

(19)日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11)特許出願公開番号

特開2003-192691

(P2003-192691A)

(43)公開日 平成15年 7 月 9 日(2003. 7. 9)

(51)Int.Cl. ⁷	識別記号	F I	テームコード*(参考)
C 0 7 F 15/00		C 0 7 F 15/00	E 3 K 0 0 7
C 0 9 K 11/06	6 6 0	C 0 9 K 11/06	6 6 0 4 H 0 5 0
	6 9 0		6 9 0
H 0 5 B 33/14		H 0 5 B 33/14	B
33/22		33/22	B
		審査請求 未請求 請求項の数 6	O L (全 55 頁)

(21)出願番号 特願2001-394446(P2001-394446)

(22)出願日 平成13年12月26日(2001. 12. 26)

(71)出願人 000005968

三菱化学株式会社

東京都千代田区丸の内二丁目5番2号

(72)発明者 秋山 誠治

神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番地

三菱化学株式会社内

(72)発明者 佐藤 秀樹

神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番地

三菱化学株式会社内

(74)代理人 100086911

弁理士 重野 剛

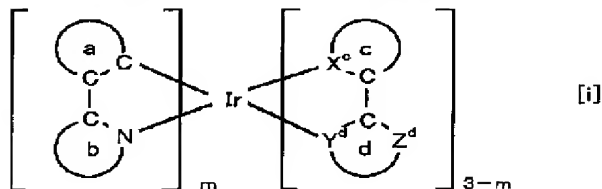
最終頁に続く

(54)【発明の名称】 有機イリジウム錯体及び有機電界発光素子

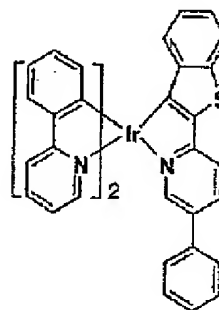
(57)【要約】 (修正有)

【課題】 長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化、及び素子の長寿命化が可能な新規混合配位子型有機イリジウム錯体と、この有機イリジウム錯体を用いた有機電界発光素子を提供する。

【解決手段】 下記一般式〔i〕で表わされる混合配位子型有機イリジウム錯体。基板上に、陽極および陰極に挟持された発光層を有する有機電界発光素子。発光層がこの混合配位子型有機イリジウム錯体を含有する。



例えば

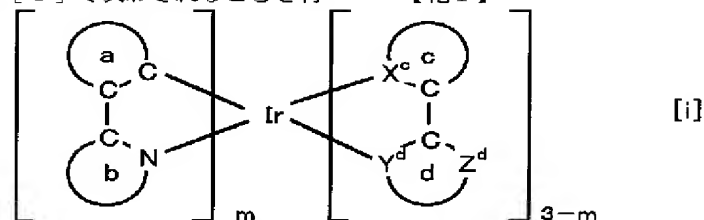


【特許請求の範囲】

【請求項1】 下記一般式 [i] で表わされることを特*

* 徴とする混合配位子型有機イリジウム錯体。

【化1】

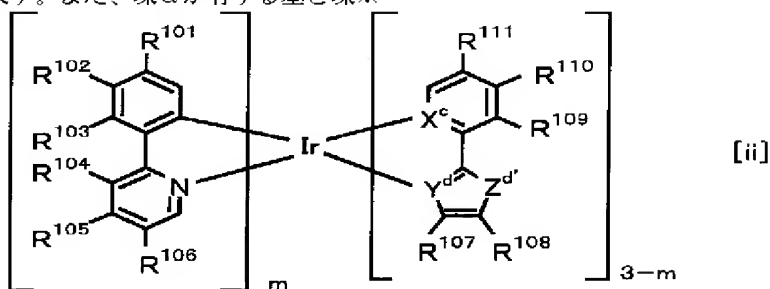


(式中、mは配位子の数を表し、1または2である。X^cおよびY^dのうち、一方は炭素原子であり他方は窒素原子である。Z^dは酸素原子、硫黄原子または-NR- (R: 水素または任意の置換基) を表す。環aは芳香族炭化水素基を示し、置換基を有しても良い。環bは窒素原子を含有する芳香族複素環基を示し、置換基を有しても良い。環cは芳香族炭化水素基もしくは芳香族複素環基を示し、置換基を有しても良い。環dは、ヘテロ原子のα位の炭素原子に任意の置換基が結合している5員環の芳香族複素環基を表す。また、環aが有する基と環※

※bが有する基が互いに結合して、環aおよび環bを含む縮合環を形成しても良い。但し、環a、環bまたは環cが芳香族複素5員環である場合、該芳香族複素5員環に含まれるヘテロ原子の、α位の炭素原子には任意の置換基が結合している。)

【請求項2】 一般式 [i] で表される化合物が、下記一般式 [ii] で表わされることを特徴とする請求項1に記載の混合配位子型有機イリジウム錯体。

【化2】

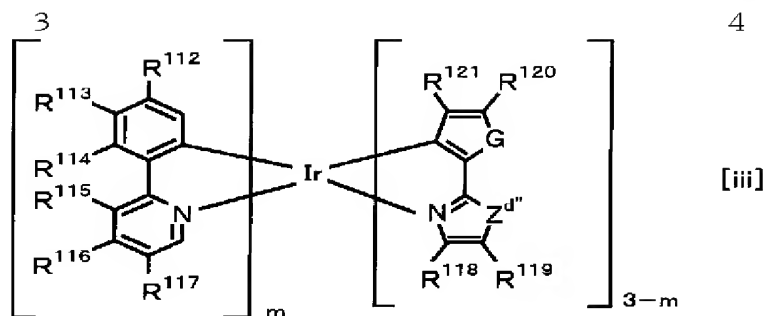


(式中、mは配位子の数を表し、1または2である。X^cおよびY^dのうち、一方は炭素原子であり他方は窒素原子である。Z^dは硫黄原子または-NR- (R: 水素または任意の置換基) を表す。R¹⁰¹~R¹⁰⁷およびR¹⁰⁹~R¹¹¹は各々独立に水素原子、ハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシ

★¹⁰⁷は水素原子以外の基である。R¹⁰⁸はハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシル基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、R¹⁰⁷と連結して環を形成しても良い。)

【請求項3】 一般式 [i] で表される化合物が、下記一般式 [iii] で表わされることを特徴とする請求項1に記載の混合配位子型有機イリジウム錯体。

【化3】



(式中、 m は配位子の数を表し、1または2である。 $Z^{d'}$ は酸素原子、硫黄原子または $-NR-$ (R :水素または任意の置換基)を表す。 G は酸素原子、硫黄原子、 $-PR-$ (R :水素または任意の置換基)、 $-CRR'-$ (R, R' :水素原子または任意の置換基)または $-NR-$ (R :水素または任意の置換基)を表す。 $R^{112} \sim R^{117}$ 及び R^{121} は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有しても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、それぞれ隣接する基同士で互いに連結して、環を形成しても良い。 R^{118}, R^{119} および R^{120} は、おのおの独立に、ハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有しても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、 R^{118} と R^{119} または R^{120} と R^{121} がそれぞれ隣接する基同士で互いに連結して、環を形成しても良い。)

【請求項4】 基板上に、陽極および陰極に挟持された発光層を有する有機電界発光素子において、該発光層が*

請求項1ないし3のいずれか1項に記載される混合配位子型有機イリジウム錯体を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

【請求項5】 該発光層が、正孔注入・輸送性または電子注入・輸送性を有するホスト化合物を含有し、該ホスト化合物に対して前記有機イリジウム錯体がドーピングされていることを特徴とする請求項4に記載の有機電界発光素子。

【請求項6】 該発光層と陰極との間に正孔阻止層を有することを特徴とする請求項4または5に記載の有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、新規な燐光色素として有用な混合配位子型有機イリジウム錯体と、この有機イリジウム錯体を用いた有機電界発光素子に関するものであり、詳しくは、薄膜型有機ELデバイスや近赤外発光材料に用いられる新規混合配位子型有機イリジウム錯体とこの有機イリジウム錯体を用いた有機電界発光素子に関するものである。

【0002】

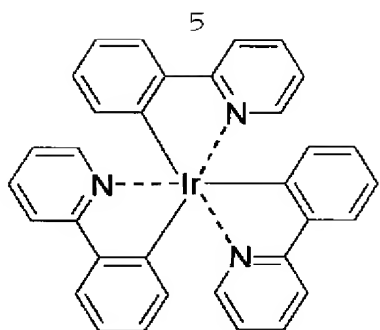
【従来の技術】従来、蛍光性色素は有機電界発光素子の分野で数多く用いられてきたが、フラットパネル・ディスプレイ等の表示、蛍光灯や標識灯等の光源、さらには近赤外発光材料として応用するためには、素子の発光効率をさらに改善する必要がある、新たな発光材料の開発が求められている。

【0003】近年、素子の発光効率を上げる試みの一つとして、3重項励起状態からの発光すなわち燐光を利用した燐光色素の利用が注目を集めている。燐光を用いた場合には従来の1重項励起状態からの発光(蛍光)に比べて、約3倍の取り出し効率を得ることが可能となり、高効率化が期待されるからである。

【0004】実際、下記の構造で表される有機イリジウム錯体(4)を4,4'-ジ(N-カルバゾリル)ビフェニル(CBP)にドーピングさせたものは、発光波長510nmの緑色発光を示し、その外部量子効率率は13%と従来の1重項発光素子の量子効率限界値(5%)を大きく上回ることが報告されている(Appl. Phys. Lett., 75巻、4項、1999年)。

【0005】

【化4】

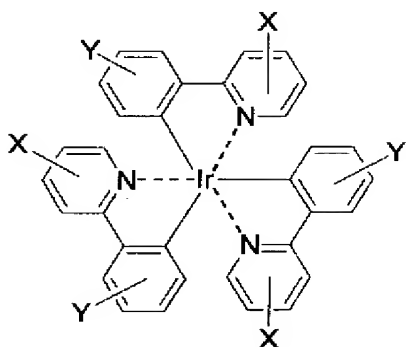


(4)

【0006】さらに上記化合物に種々の置換基を導入してなる下記化合物(5)を使用することにより、発光波長のチューニングが可能であることも報告されている (Chem. Commun., 2001, 1494)。

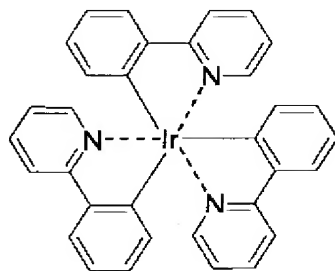
【0007】

【化5】



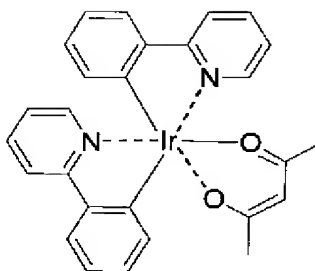
(5)

20



(6)

*



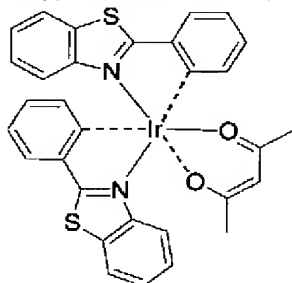
(7)

【0012】さらに、下記に示す化合物(8)や(9)をドーパントとして用いた場合には、緑色よりも長波長に発光を有し、かつ従来の一重項発光素子に比べて高効率の電界発光素子になることが明らかにされている (J. ※40

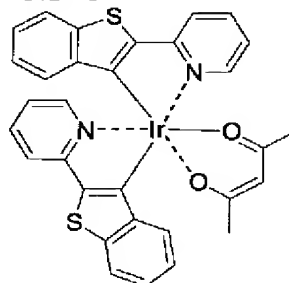
※Am. Chem. Soc., 2001, 123,4304., 特開W0 01/41512号公報, Appl. Phys. Lett., 79巻、13項、2001年)。

【0013】

【化7】



(8)



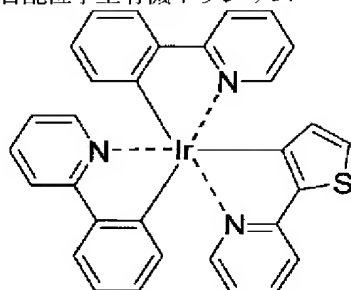
(9)

【0014】しかしながら、有機電界発光素子のフルカ★50★ラーフラットパネルディスプレイや白色蛍光灯などへの

応用を考えた場合には、長波長の発光（たとえば黄色、オレンジ、赤色発光など）におけるさらなる発光の高効率化が必要である。

【0015】上記の結果を踏まえ、本発明者らは高効率化の期待できる配位子と長波長発光の期待できる配位子を同一分子に配位させることにより、さらなる高効率化が期待できるものと考えた。

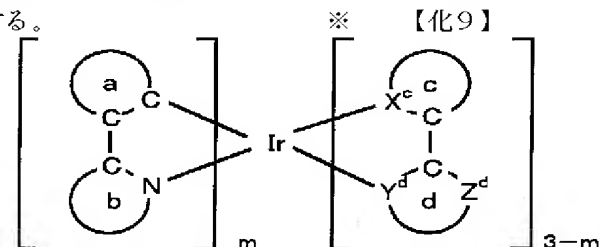
【0016】このような、混合配位子型有機イリジウム*



(10)

【0018】

【発明が解決しようとする課題】本発明は、長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化、及び素子の長寿命化が可能な新規混合配位子型有機イリジウム錯体と、この有機イリジウム錯体を用いた有機電界発光素子を提供することを目的とする。



（式中、mは配位子の数を表し、1または2である。X^cおよびY^dのうち、一方は炭素原子であり他方は窒素原子である。Z^dは酸素原子、硫黄原子または-NR-（R：水素または任意の置換基）を表す。環aは芳香族炭化水素基を示し、置換基を有しても良い。環bは窒素原子を含む芳香族複素環基を示し、置換基を有しても良い。環cは芳香族炭化水素基もしくは芳香族複素環基を示し、置換基を有しても良い。環dは、ヘテロ原子のα位の炭素原子に任意の置換基が結合している5員環の芳香族複素環基を表す。また、環aが有する基と環bが有する基が互いに結合して、環aおよび環bを含む縮合環を形成しても良い。但し、環a、環bまたは環cが芳香族複素5員環である場合、該芳香族複素5員環に含まれるヘテロ原子の、α位の炭素原子には任意の置換基が結合している。）

【0021】即ち、本発明者らは、長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化および素子の長寿命化を目的として鋭意検討した結果、上記一般式[i]で表される新規混合配位子型有機イリジウム錯体が、優れた性能を有する3重項燐光色素であり、長波長発光における★50

*錯体としては、特開2001-247859号公報、US2001/0019782号公報において下記化合物(10)が最近報告されたが、配位子に含まれる無置換のチオフェン環は反応活性であるため、有機電界発光素子の長寿命化を考えた場合には不適切である。

【0017】

【化8】

※【0019】

20 【課題を解決するための手段】本発明の混合配位子型有機イリジウム錯体は、下記一般式[i]で表わされるものである。

【0020】

【化9】

[i]

★色純度、及び発光効率に優れる上に安定で長寿命であることを見出し、本発明を完成させた。

【0022】本発明の上記有機イリジウム錯体では、錯体を形成する配位子中の、Irに配位結合している環d等の芳香族複素5員環におけるヘテロ原子の、α位の炭素原子（以下「α-炭素」と称する場合がある。）に何らかの置換基を結合させることにより、本発明の錯体化合物の安定性を向上させ、実用に足る長寿命化を達成した。

40 【0023】即ち、本発明の有機イリジウム錯体における環dのように、ヘテロ原子を含む芳香族複素5員環は、他の芳香族炭化水素環や複素環の中でも反応性が高く、特にα位は非常に反応活性が高く、たとえば求電子置換反応、プロトン化、ディールスアルダー反応等の高い反応性を示す。このため、α-炭素が無置換の芳香族複素5員環を含む配位子を有する化合物を、有機電界発光素子のEL材料に用いた場合、このα-炭素の高い反応活性のために素子の安定性が低下し、発光効率の低下、低寿命化の原因につながる。

【0024】本発明では環d等の芳香族複素5員環のα

一炭素に任意の置換基を導入したために、有機電界発光素子の発光層に用いた場合、当該有機イリジウム錯体の安定性に優れ、これにより、素子の安定性の向上及び発光効率の向上と長寿命化を達成することができる。

【0025】また、本発明の混合配位子型イリジウム錯体は、異なる2つの2座配位子を有していることも特徴であり、このようなイリジウム錯体はフェニルピリジンのみを有する、前記化合物(6) ($\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 錯体)もしくは前記化合物(7) ($(\text{ppy})_2\text{Iracac}$ 錯体)に比べて長波長に発光を有しており、その発光は近赤外に及ぶものもある。

【0026】本発明ではこのように2種の2座配位子の組合せが非常に重要であり、この組合せにより、高効率、高輝度を有する有機電界発光素子が得られる。

【0027】本発明の有機電界発光素子は、基板上に、陽極および陰極に挟持された発光層を有する有機電界発光素子において、該発光層が上記本発明の混合配位子型有機イリジウム錯体を含むことを特徴とするものである。

【0028】

【発明の実施の形態】以下、本発明の有機イリジウム錯体及び有機電界発光素子を詳細に説明する。

【0029】まず、本発明の混合配位子型イリジウム錯体について説明する。

【0030】本発明の有機イリジウム錯体は前記一般式[i]で示される構造のものである。

【0031】前記一般式[i]において、環aは置換基を有していても良い芳香族炭化水素環を表し、好ましくは6員環である。環bは置換基を有していても良い含窒素芳香族複素環を表し、好ましくは5または6員環である。環cは置換基を有していても良い、芳香族炭化水素*

*環または芳香族複素環であり、好ましくは5または6員環である。環a、環bまたは環cが芳香族複素5員環である場合、該芳香族複素5員環に含まれるヘテロ原子の、 α -位の炭素原子(α -炭素)には任意の置換基が結合している。

【0032】環dは、ヘテロ原子の α -位の炭素原子に、任意の置換基が結合している5員環の芳香族複素環であり、環dは、このヘテロ原子の α -位の炭素原子(α -炭素)の置換基以外にも置換基を有していても良い。

【0033】環dの α -炭素に結合した置換基としては、後述の一般式[ii]、[iii]の置換基 $\text{R}^{101} \sim \text{R}^{121}$ として例示した置換基等が挙げられ、この α -炭素上の置換基と、 α -炭素の隣の炭素原子上の置換基とが結合して環を形成していても良い。

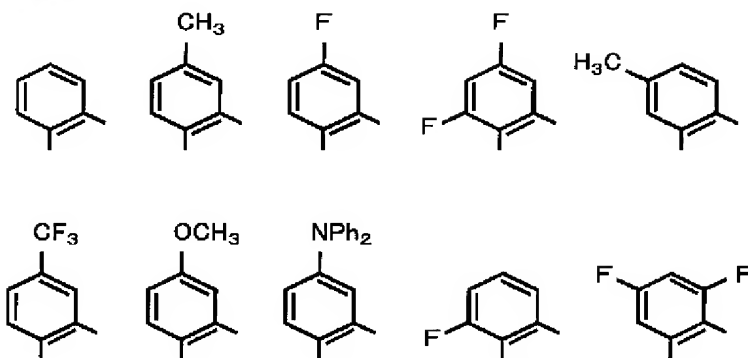
【0034】また、環a～環cが置換基を有している場合、環dが α -炭素の置換基以外の置換基を有している場合、当該置換基としても、置換基 $\text{R}^{101} \sim \text{R}^{121}$ として例示した置換基等が挙げられ、隣接する炭素原子上の置換基が互いに結合して環を形成していても良い。

【0035】また、 α -炭素上の置換基を含めて、隣接する炭素原子上の置換基が互いに結合して環を形成している場合、この環に更に置換基を有していても良く、この場合の置換基としては、置換基 $\text{R}^{101} \sim \text{R}^{121}$ として例示した置換基等が挙げられる。

【0036】以下に、環aないし環dの具体例を挙げるが、本発明の要旨を超えない限りこれらに限定されるものではない。なお、以下において、「Ph」は「フェニル基」を示す。

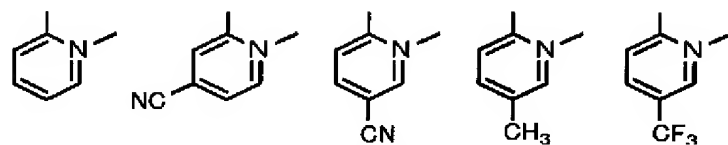
【0037】

【化10】



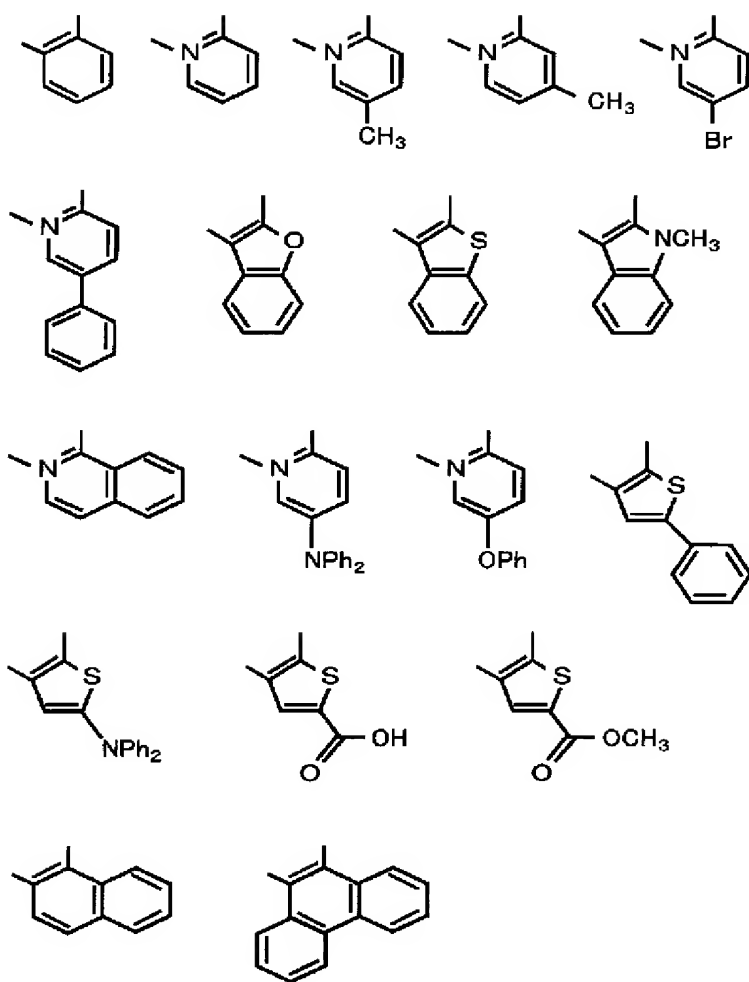
【0038】

【環b】



【0039】

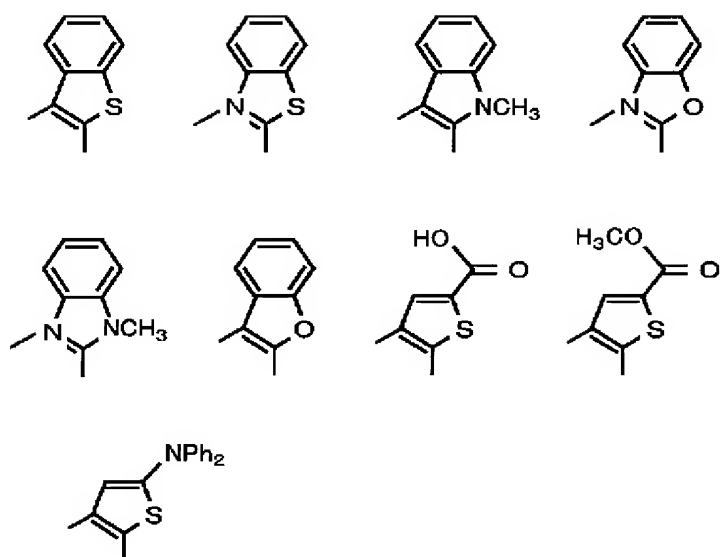
★50★【化12】



【0040】

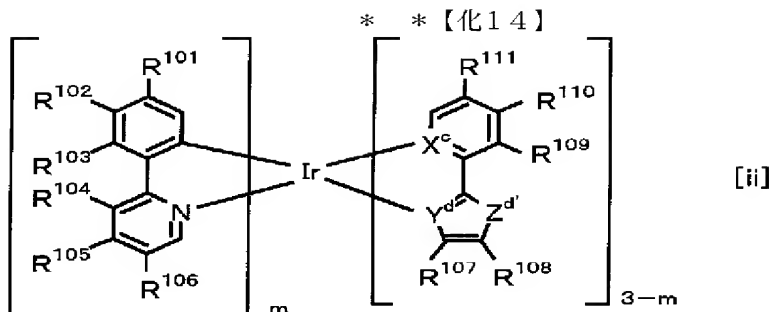
* * 【化13】

[環d]



【0041】本発明の有機イリジウム錯体は、好ましく※50※は下記一般式 [ii] もしくは [iii] で表される。

【0042】

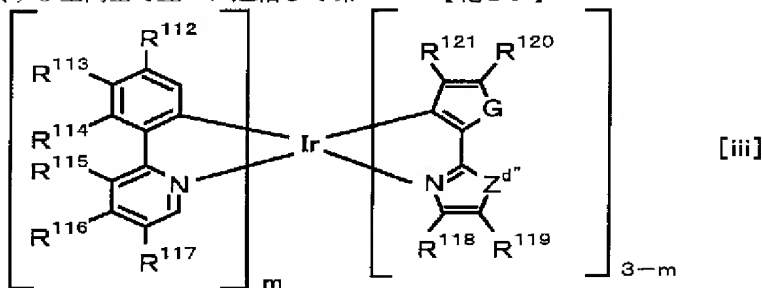


(式中、mは配位子の数を表し、1または2である。X^oおよびY^dのうち、一方は炭素原子であり他方は窒素原子である。Z^{d'}は硫黄原子または-NR- (R: 水素または任意の置換基)を表す。R¹⁰¹~R¹⁰⁷およびR¹⁰⁹~R¹¹¹は各々独立に水素原子、ハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリーールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリーールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリーールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、それぞれ隣接する基同士で互いに連結して環※

10※を形成しても良い。ただし、Yが窒素原子の場合、R¹⁰⁷は水素原子以外の基である。R¹⁰⁸はハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリーールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリーールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリーールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、R¹⁰⁷と連結して環を形成しても良い。)

【0043】

【化15】



(式中、mは配位子の数を表し、1または2である。Z^{d''}は酸素原子、硫黄原子または-NR- (R: 水素または任意の置換基)を表す。Gは酸素原子、硫黄原子、-PR- (R: 水素または任意の置換基)、-CRR'- (R, R': 水素原子または任意の置換基)または-NR- (R: 水素または任意の置換基)を表す。R¹¹²~R¹¹⁷及びR¹²¹は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有しても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリーールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキ★50

★シカルボニル基、置換基を有しても良いアリーールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリーールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、それぞれ隣接する基同士で互いに連結して、環を形成しても良い。R¹¹⁸、R¹¹⁹およびR¹²⁰は、おのおの独立に、ハロゲン原子、置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアルキニル基、置換基を有し

ても良いアラルキル基、置換基を有しても良いアミノ基、置換基を有しても良いアルコキシ基、置換基を有しても良いアリールオキシ基、置換基を有しても良いアシル基、置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基、置換基を有しても良いアリールオキシカルボニル基、置換基を有しても良いアシルオキシ基、置換基を有しても良いアルキルチオ基、置換基を有しても良いアリールチオ基、置換基を有しても良いスルホニル基、置換基を有しても良いシリル基、置換基を有しても良いボリル基、置換基を有しても良いホスフィノ基、カルボキシル基、シアノ基、水酸基、メルカプト基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、 R^{118} と R^{119} または R^{120} と R^{121} がそれぞれ隣接する基同士で互いに連結して、環を形成しても良い。))

【0044】上記一般式 [ii] 及び [iii] の $R^{101} \sim R^{121}$ の置換基としては次のようなものが挙げられる。

【0045】ハロゲン原子：たとえばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子

置換基を有しても良いアルキル基：好ましくは炭素数1から8の直鎖または分岐のアルキル基であり、たとえばメチル、エチル、*n*-プロピル、2-プロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル基など

置換基を有しても良いアルケニル基：好ましくは炭素数1から8のアルケニル基であり、たとえばビニル、アリル、1-ブテニル基など

置換基を有しても良いアルキニル基：好ましくは炭素数1から8のアルキニル基であり、たとえばエチニル、プロパルギル基など

置換基を有しても良いアラルキル基：たとえばベンジル基、フェネチル基など置換基を有しても良いアミノ基：好ましくは、置換基に炭素数1から8のアルキル基を1つ以上有するアルキルアミノ基であり、たとえばメチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ基など；置換基を有しても良いアリールアミノ基であり、たとえばフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノ基など；更に置換基を有しても良いヘテロアリールアミノ基であり、たとえばピリジルアミノ、チエニルアミノ、ジチエニルアミノ基など；置換基を有していても良いアシルアミノ基であり、たとえば、アセチルアミノ基、ベンゾイルアミノ基など

置換基を有しても良いアルコキシ基：好ましくは置換基を有しても良い炭素数1～8のアルコキシ基、たとえばメトキシ、エトキシ、ブトキシ基など

置換基を有しても良いアリールオキシ基：好ましくは芳香族炭化水素基や複素環基を有するものであり、たとえばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシ、ピリジルオキシ、チエニルオキシ基など

置換基を有しても良いアシル基：好ましくは、置換基を有しても良い炭素数1～8のアシル基であり、たとえばホルミル、アセチル、ベンゾイル基など

置換基を有しても良いアルコキシカルボニル基：好ましくは置換基を有しても良い炭素数2～13のアルコキシカルボニル基であり、たとえばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル基など

置換基を有しても良いアリールオキシカルボニル基：好ましくは置換基を有しても良い炭素数5～20のアリールオキシカルボニル基であり、たとえばフェニルオキシカルボニル基、チエニルオキシカルボニル基など

置換基を有しても良いアシルオキシ基：たとえばアセチルオキシ基、ベンゾイルオキシ基など

置換基を有しても良いアルキルチオ基：好ましくは炭素数1～8のアルキルチオ基であり、たとえば、メチルチオ基、エチルチオ基など

置換基を有しても良いアリールチオ基：好ましくは炭素数6～20のアリールチオ基であり、たとえば、フェニルチオ基、1-ナフチルチオ基など

置換基を有しても良いスルホニル基：たとえばメシル基、トシル基など

置換基を有しても良いシリル基：たとえばトリメチルシリル基、トリフェニルシリル基など

置換基を有しても良いボリル基：たとえばジメチルボリル基など

置換基を有しても良いホスフィノ基：たとえばジフェニルホスフィノ基など

カルボキシル基

シアノ基

水酸基

メルカプト基

置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基：好ましくは、5または6員環の、単環または2縮合環である、芳香族炭化水素環または芳香族複素環であり、例えばフェニル基、1-ナフチル基、チエニル基、フリル基、ピリジル基など

【0046】上記置換基が更に置換基を有する場合、この置換基としては、ハロゲン原子、又は炭素数1～10のアルキル基が挙げられる。

【0047】また、 $Z^{d'}$ 、 $Z^{d''}$ の-NR-、Gの-RR-、-CRR'-、-NR-のR、R'の任意の置換基としては、メチル基、エチル基などの炭素数1～10のアルキル基、フェニル基等の芳香族炭化水素基、チエニル基等の芳香族複素環基が挙げられる。

【0048】一般式 [ii] および [iii] において、 R^{103} 、 R^{104} 、 R^{109} 、 R^{114} および R^{115} として好ましくは、水素原子、フッ素原子、アルキル基またはアルケニル基を表わすか、それぞれ隣接する基と結合して環を形成する場合である。

【0049】 $R^{101} \sim R^{106}$ 、Yが炭素原子である場合の R^{109} 、および R^{110} 、 R^{111} として好ましくは、水素原子、フッ素原子、塩素原子、置換基を有しても良いアルキル基（たとえばメチル基、エチル基、トリフルオロメ

10

20

30

40

50

17

チル基)、シアノ基、アミノ基(たとえばジフェニルアミノ基、カルバゾール基)、アシル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、カルボキシ基、水酸基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表すか、それぞれ隣接する基と結合して環を形成する場合である。

【0050】有機イリジウム錯体において、配位子中の芳香族複素5員環におけるヘテロ原子の α -炭素に結合する基、すなわち一般式 [ii] においてYが窒素原子の場合のR¹⁰⁷、R¹⁰⁸、一般式 [iii] におけるR¹¹⁸、R¹¹⁹およびR¹²⁰は、水素原子以外の基である。好ましく*

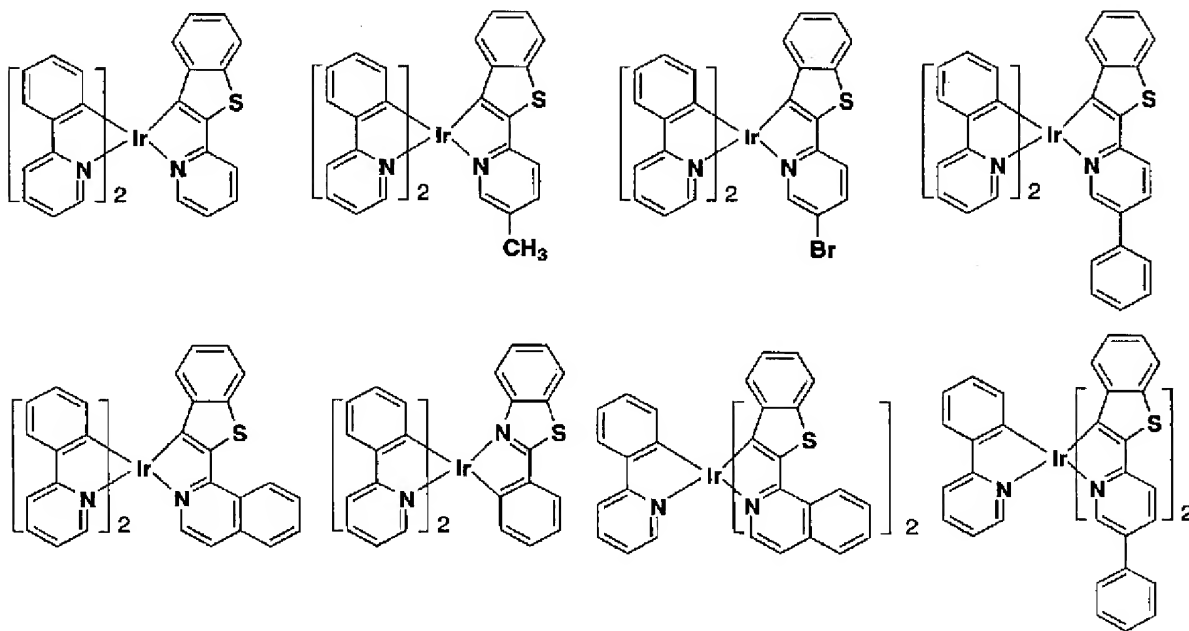
18

*は置換基を有しても良いアルキル基、置換基を有しても良いアルケニル基、置換基を有しても良いアシル基、カルボキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基であり、これらはそれぞれ隣接する置換基と互いに連結して、環を形成しても良い。

【0051】下記に本発明の混合配位子型有機イリジウム錯体の代表例を示すが、本発明の有機イリジウム錯体は何らこれらに限定されるものではない。

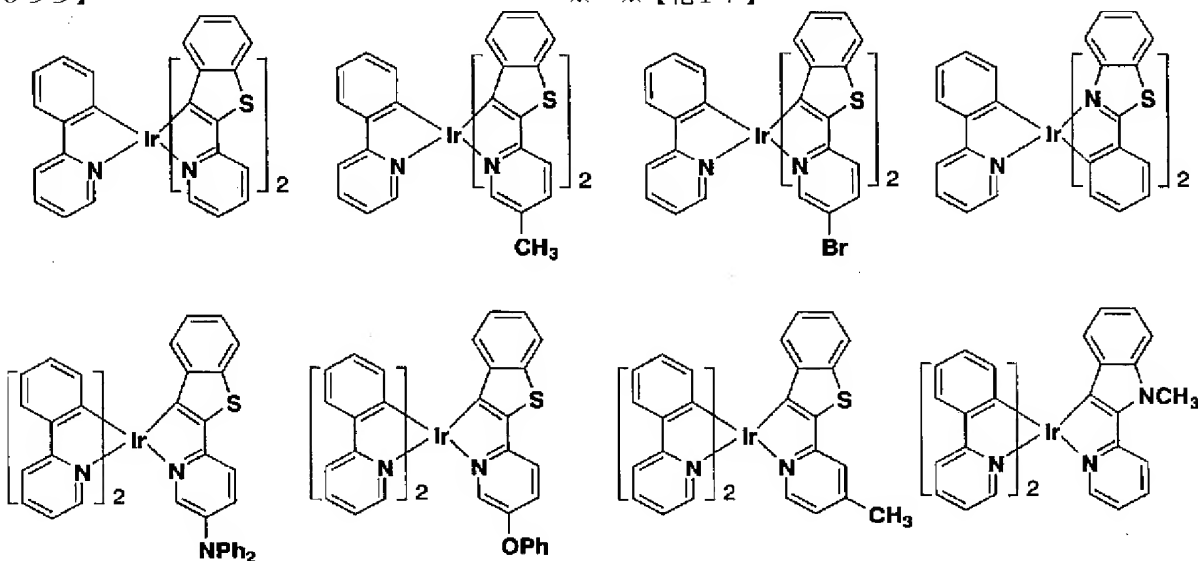
【0052】

【化16】



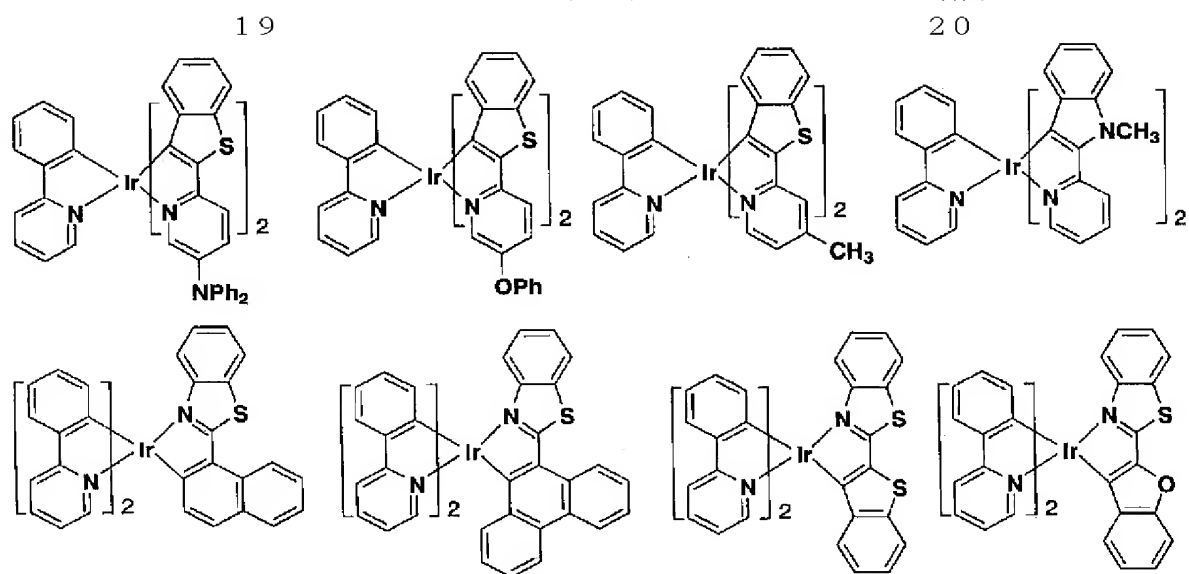
【0053】

※ ※【化17】



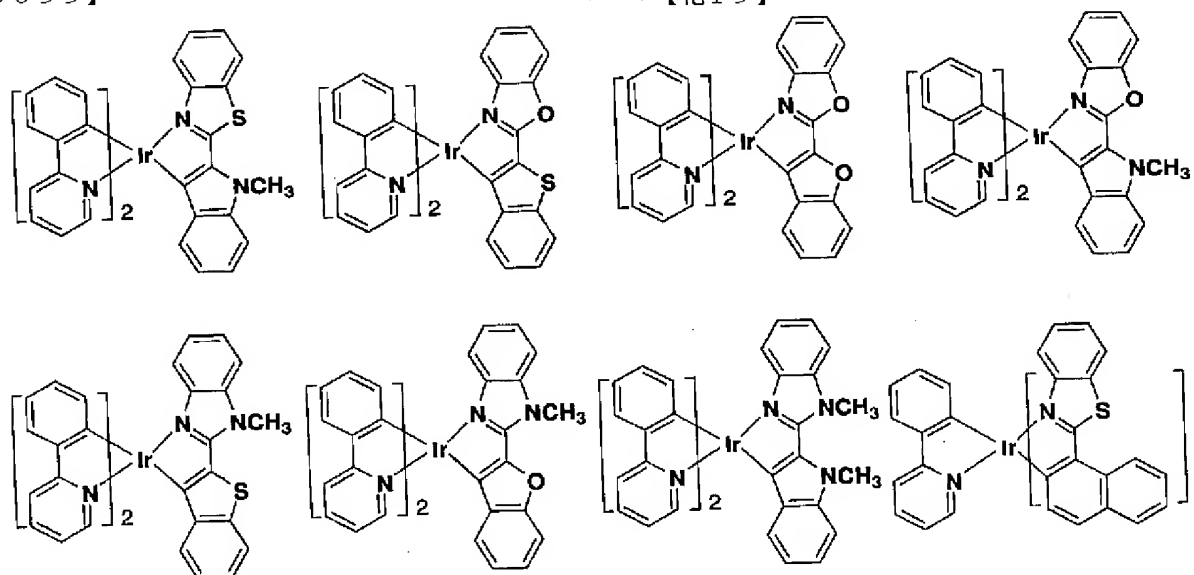
【0054】

★ ★【化18】



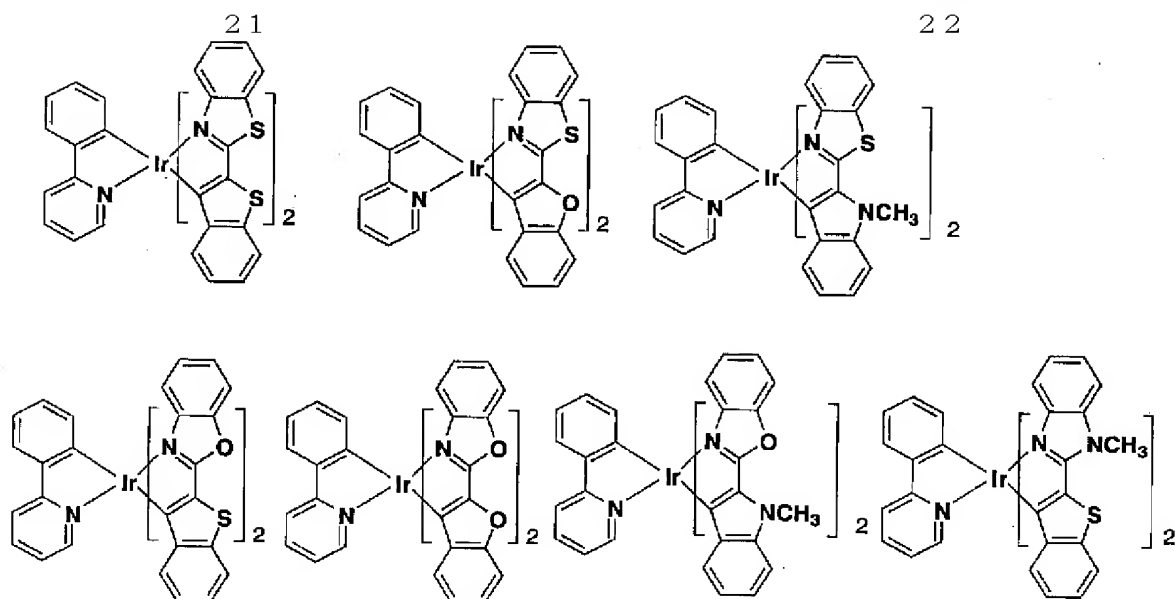
【0055】

* * 【化19】



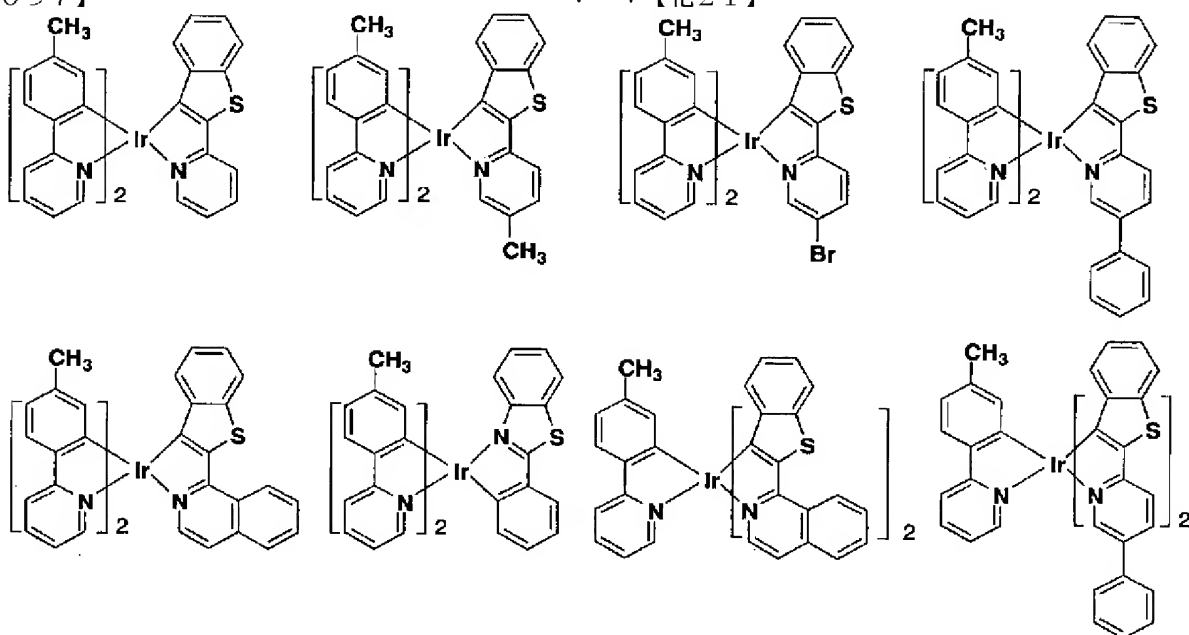
【0056】

* * 【化20】



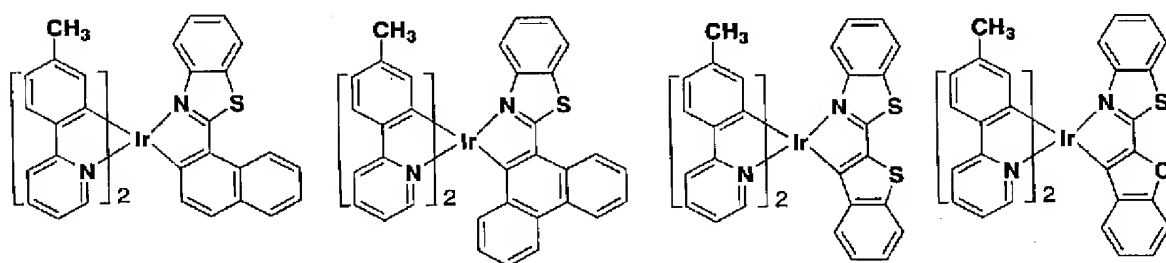
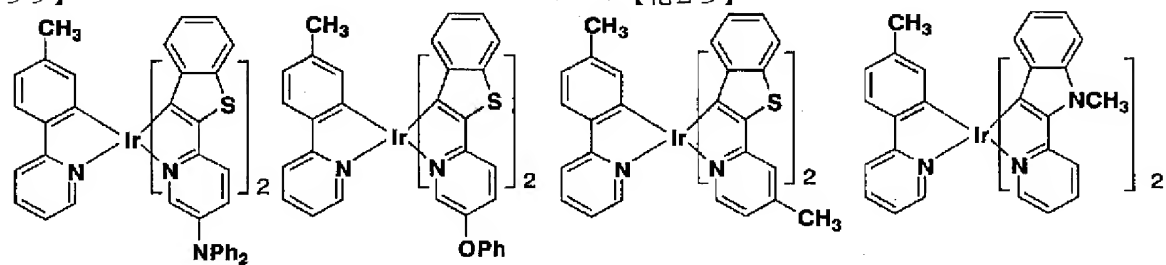
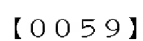
【0057】

* * 【化21】



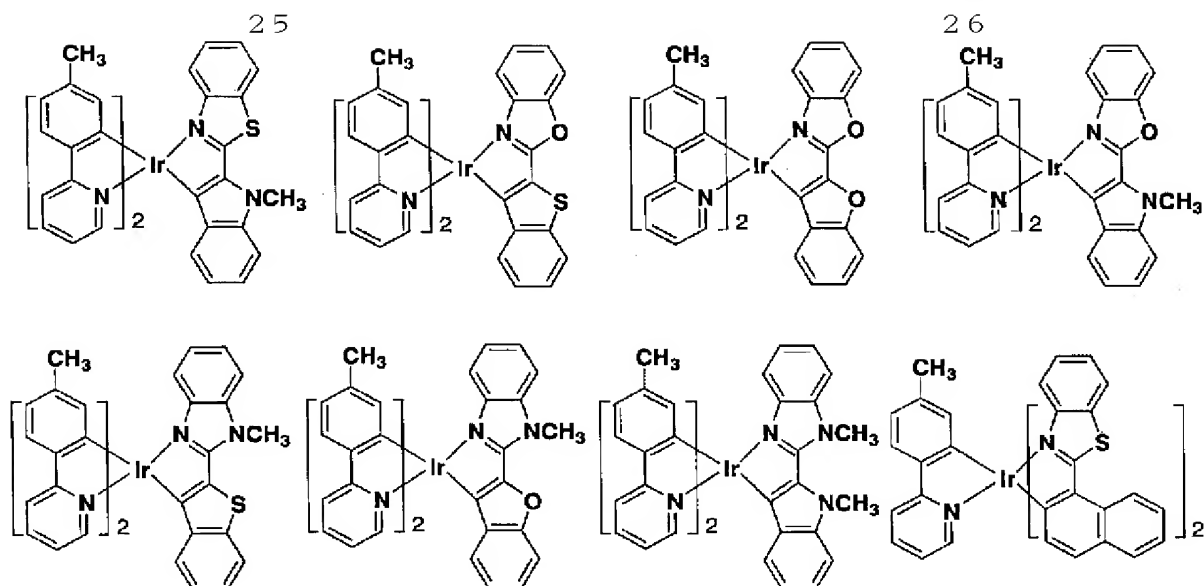
【0058】

* * 【化22】



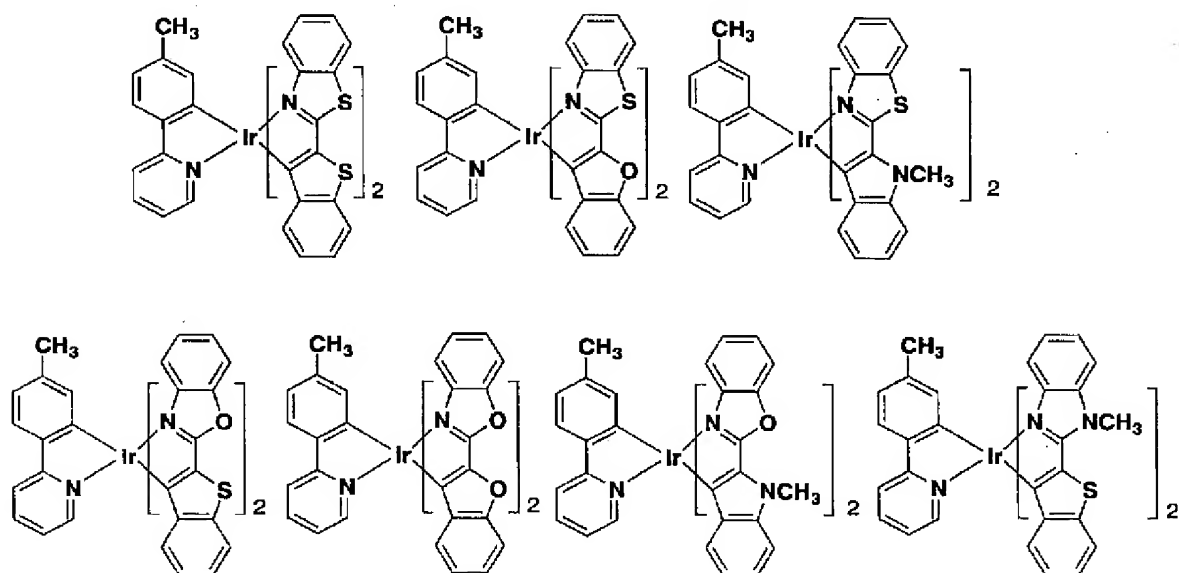
【0060】

※ ※【化24】



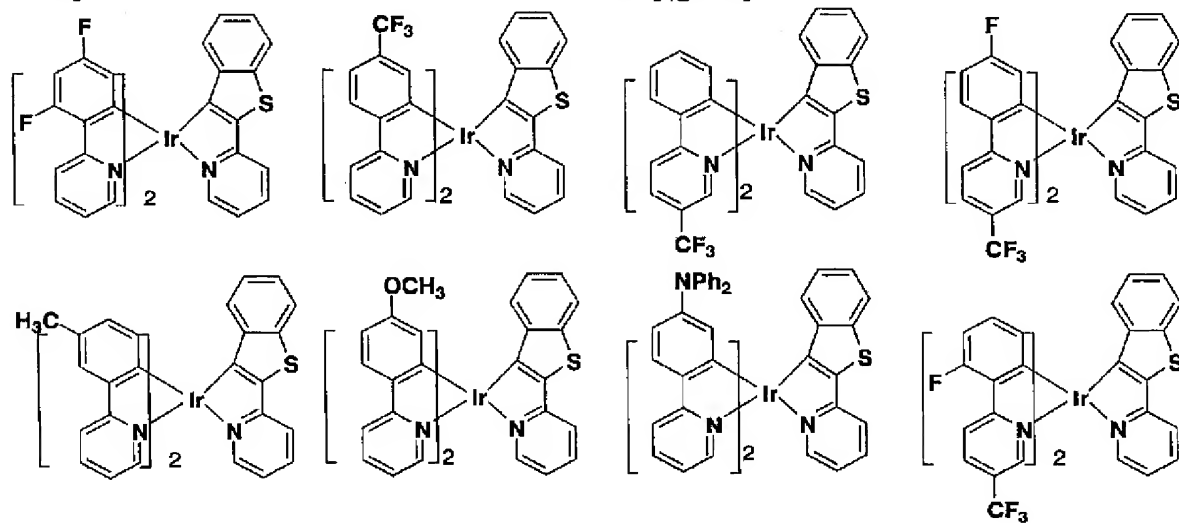
【0061】

* * 【化25】



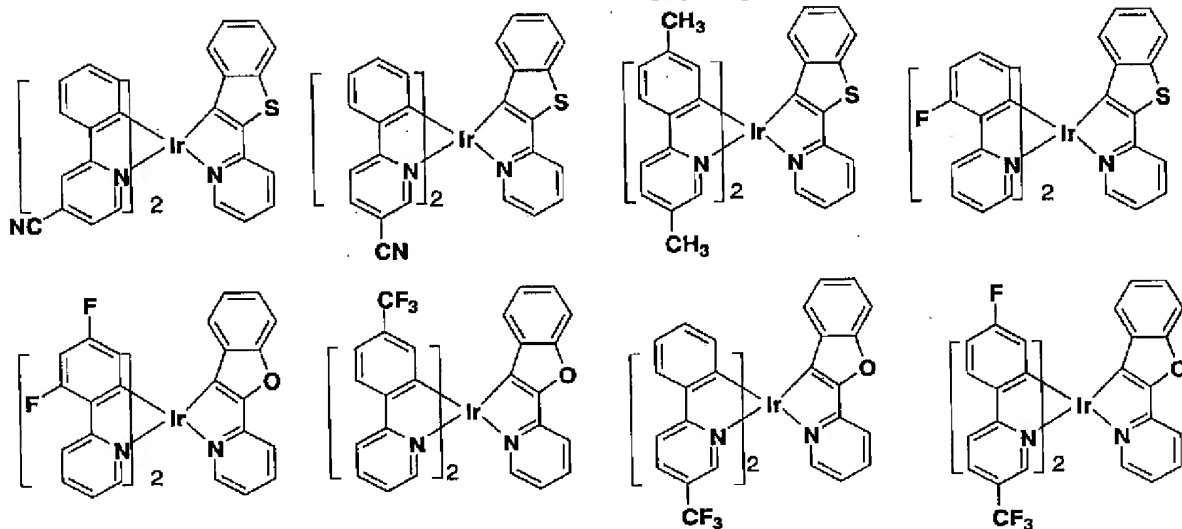
【0062】

* * 【化26】



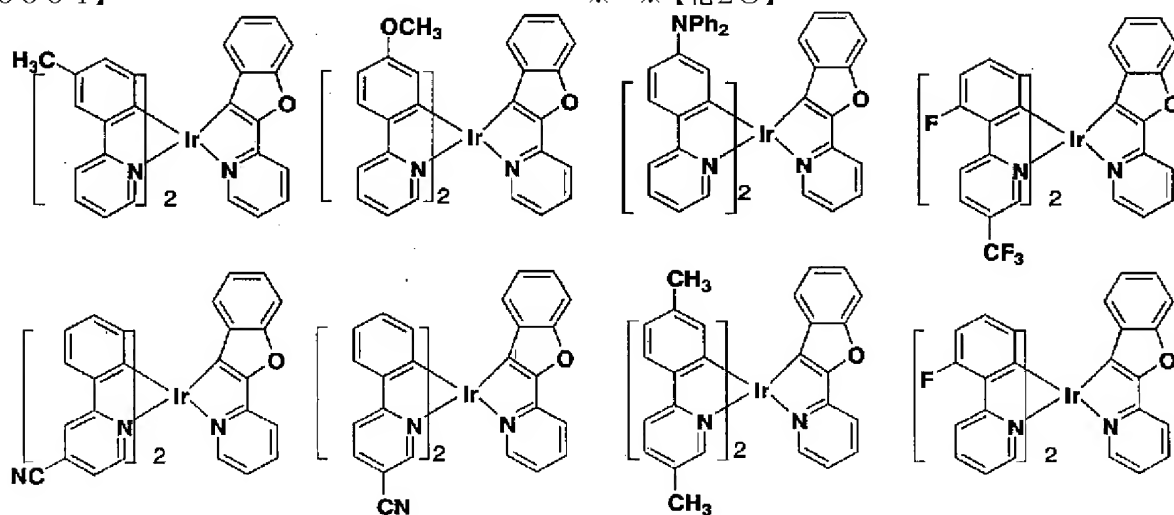
【0063】

* * 【化27】



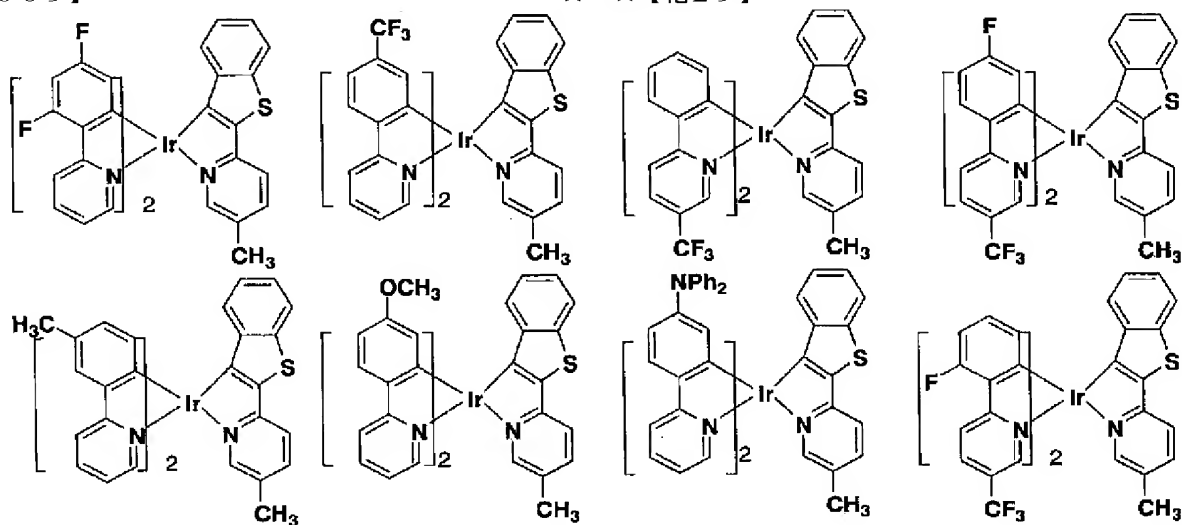
【0064】

* * 【化28】



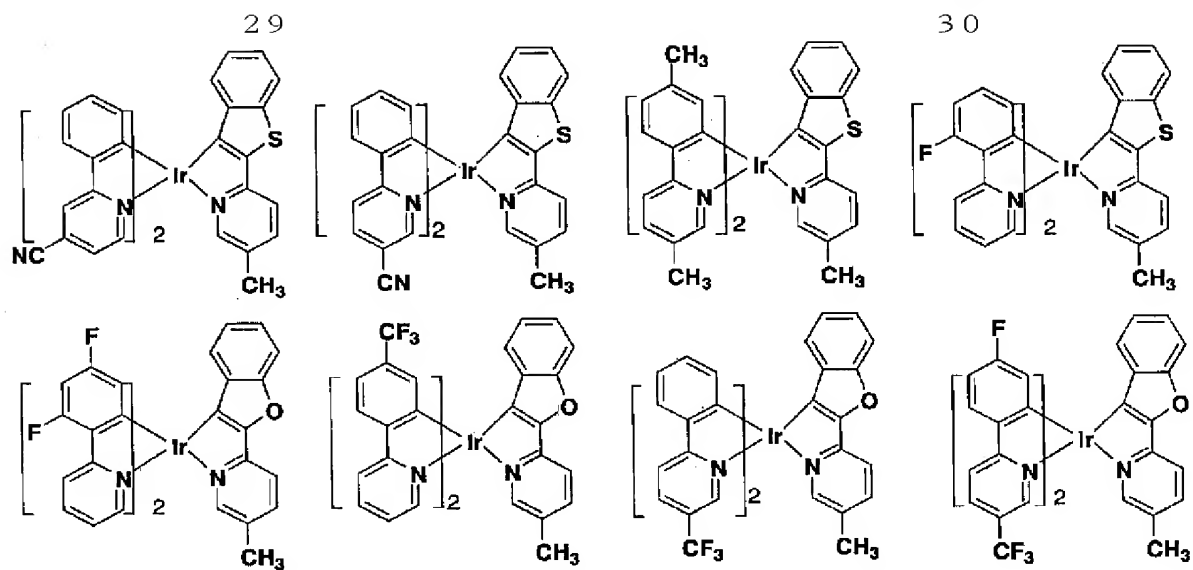
【0065】

* * 【化29】

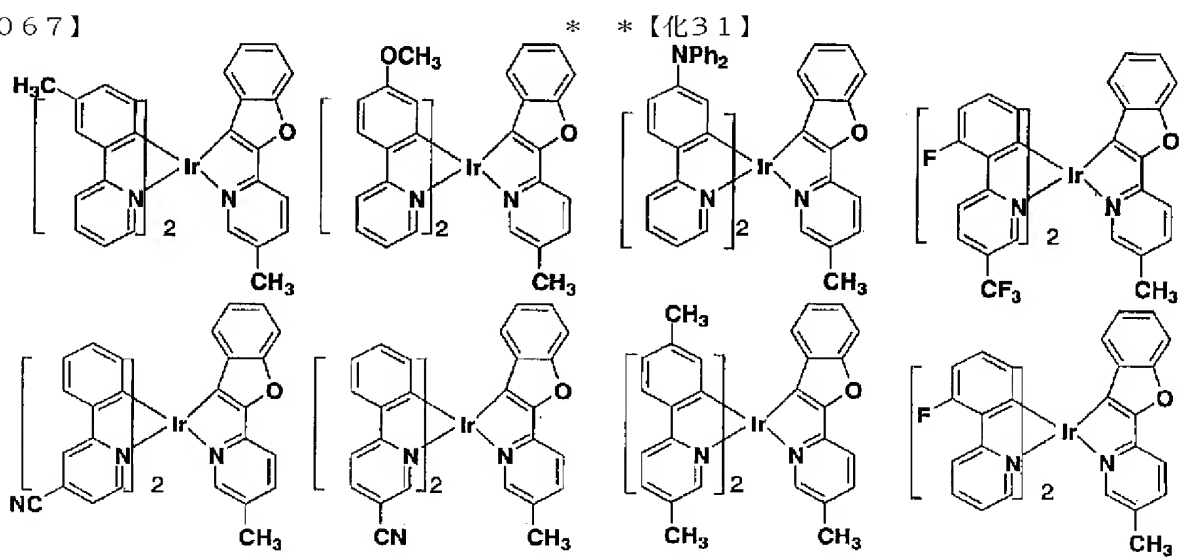


【0066】

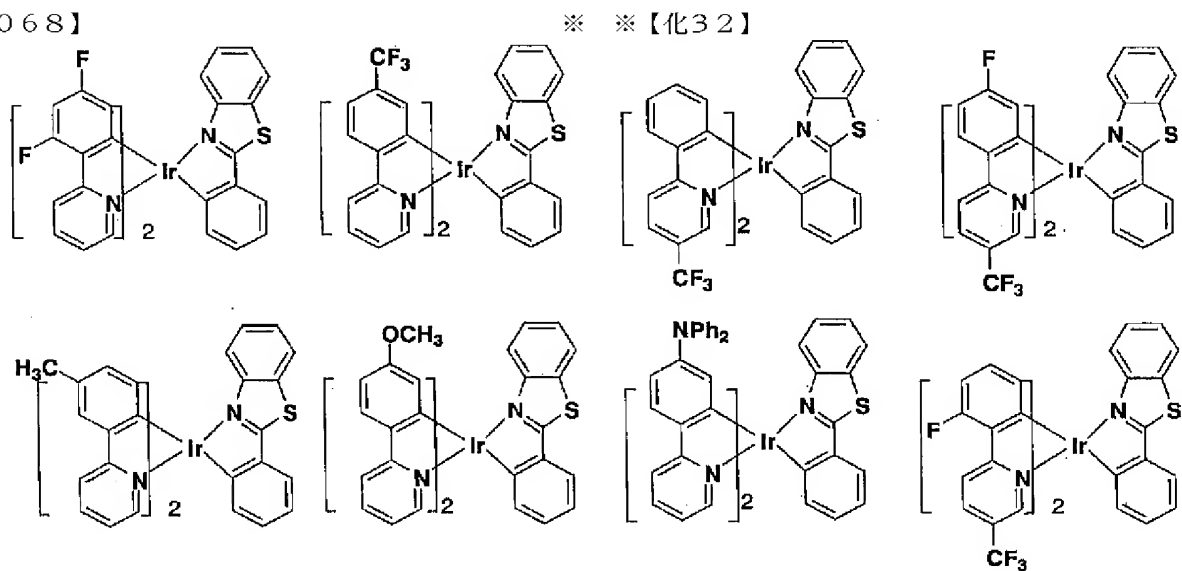
☆50☆ 【化30】



【0067】

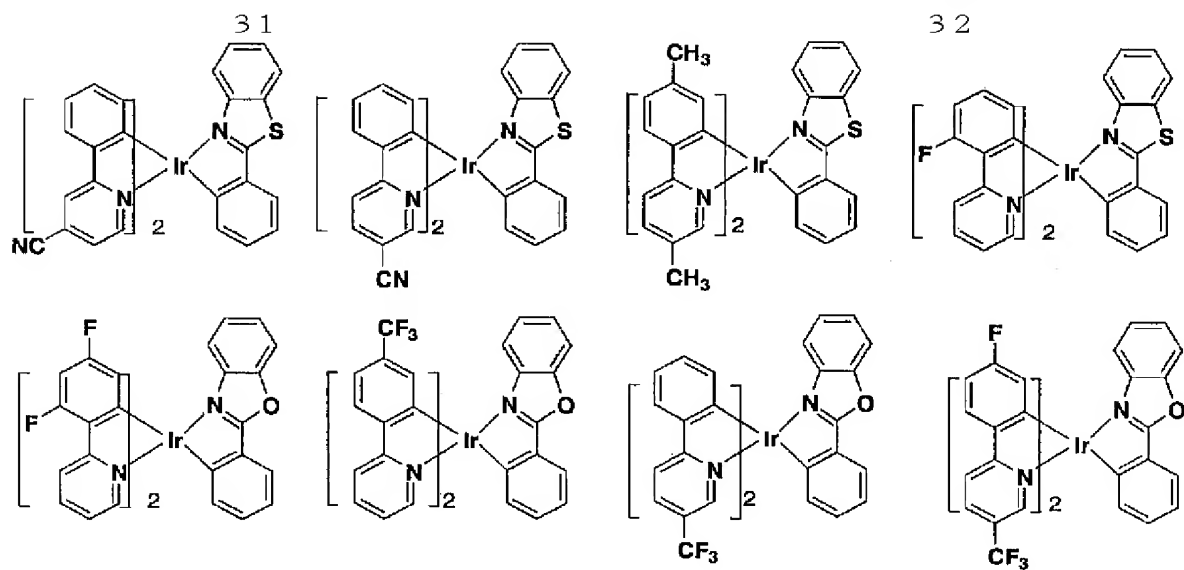


【0068】



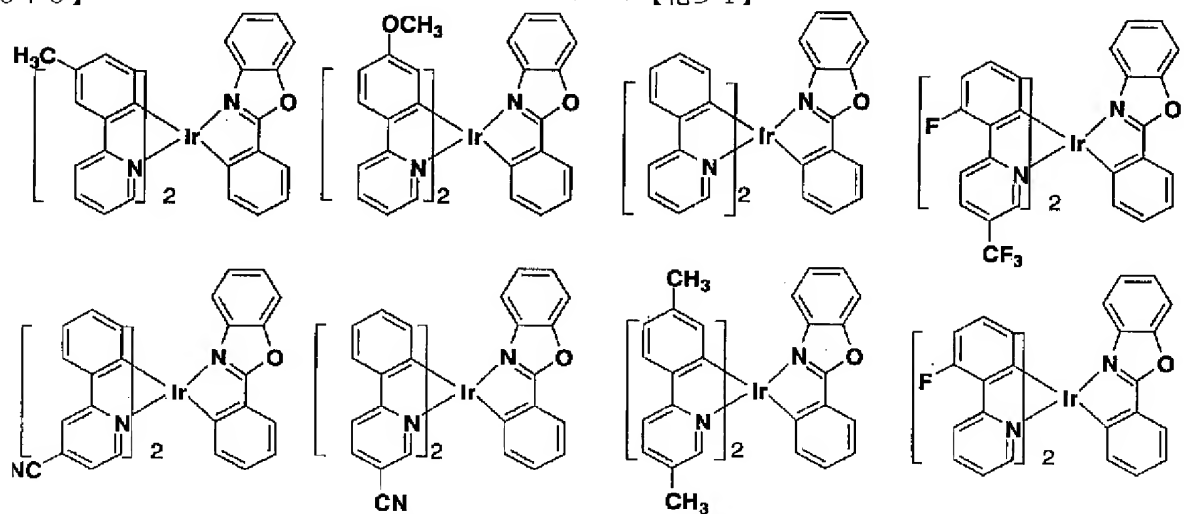
【0069】

★50★ 【化33】



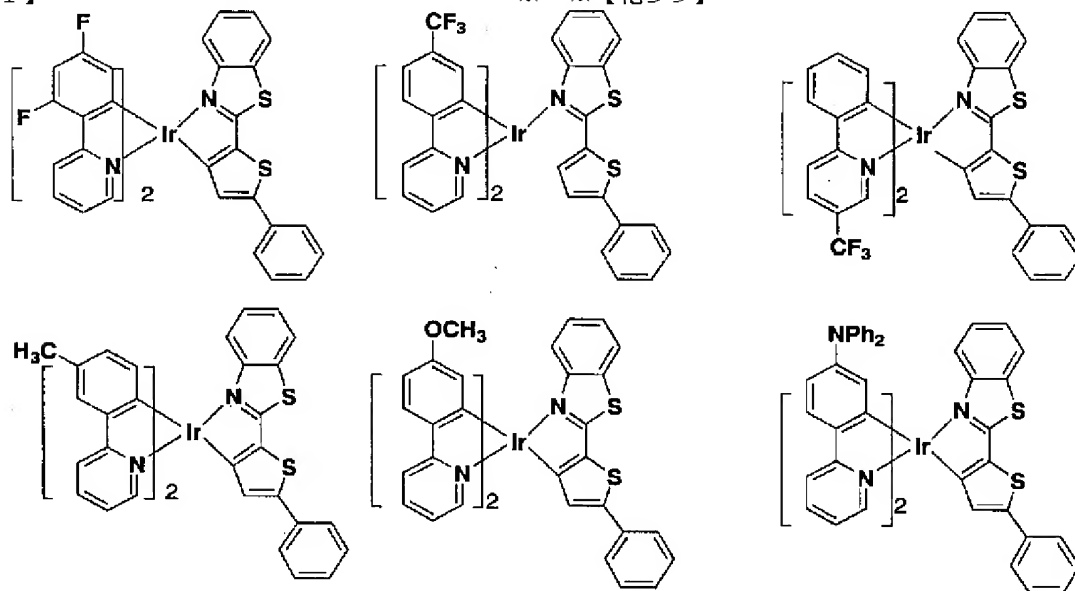
【0070】

* * 【化34】



【0071】

* * 【化35】

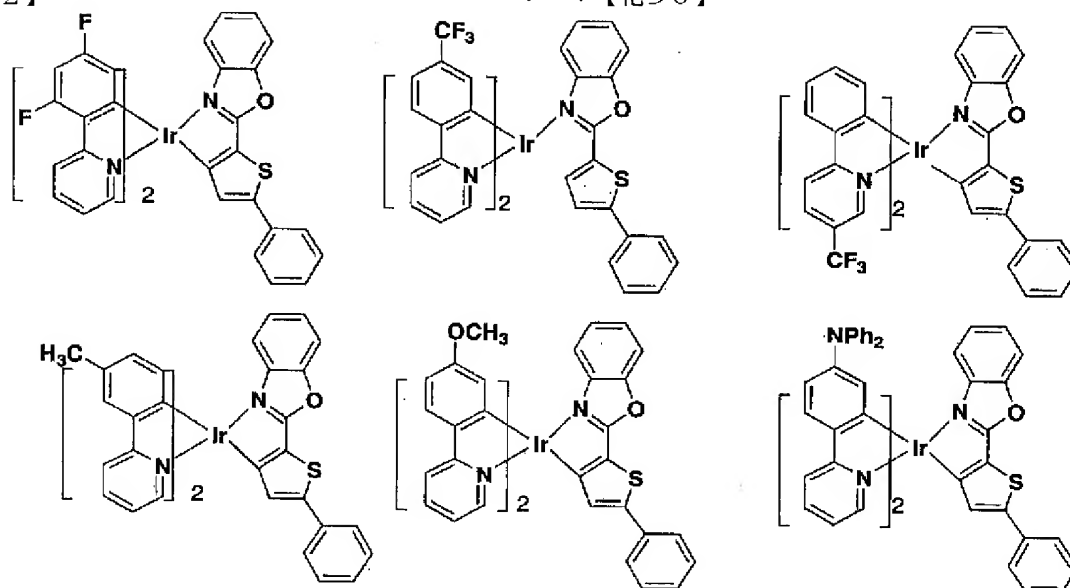


33

34

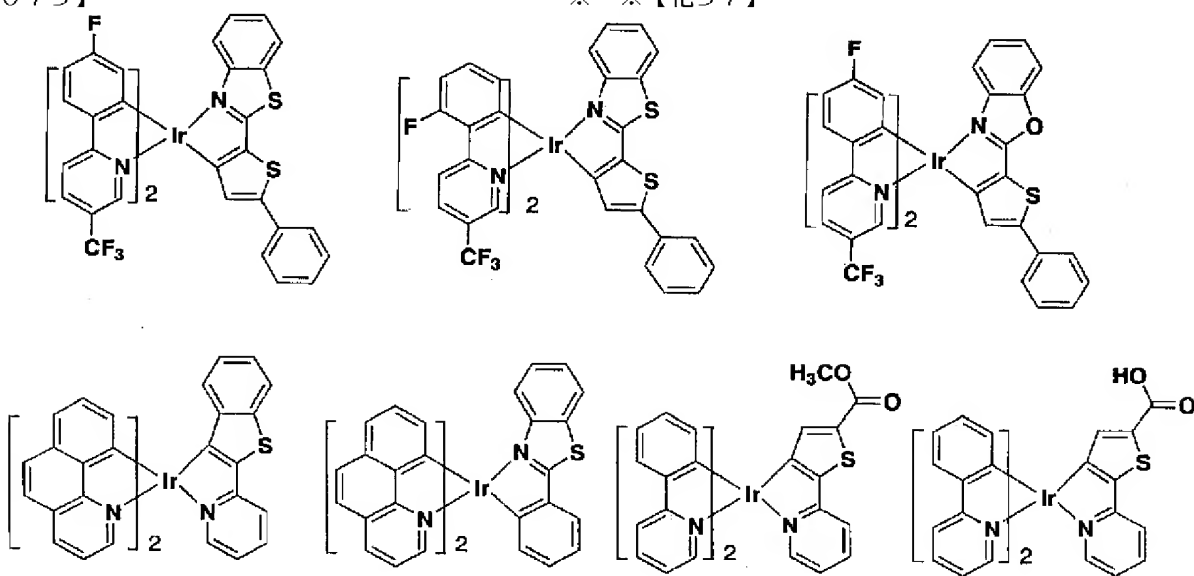
【0072】

* * 【化36】



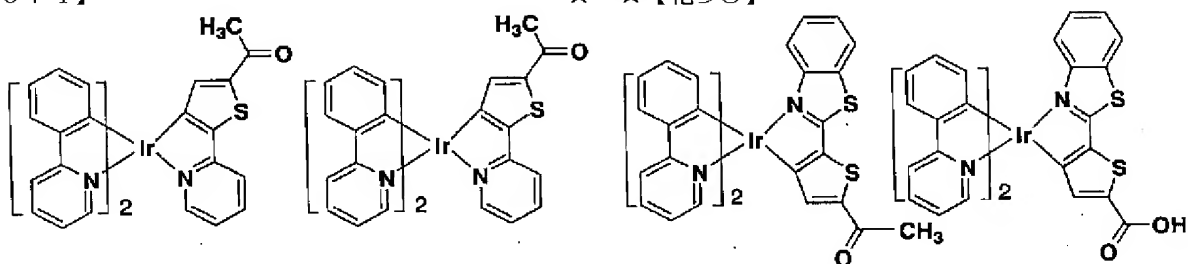
【0073】

※ ※ 【化37】



【0074】

★ ★ 【化38】



【0075】前記一般式〔i〕で表される化合物は、通常、分子量2000以下、好ましくは1500以下である。また該化合物における各配位子の分子量は800以下、内、置換基を有していてもよい基の分子量は計300以下程度である。

☆【0076】本発明の有機電界発光素子は、基板上に陽極及び陰極に挟持された発光層を有し、この発光層に上述のような本発明の有機イリジウム錯体を含むものである。この有機イリジウム錯体は、正孔注入・輸送性または電子注入・輸送性を有するホスト化合物にドーピングされ

35

て発光層中に含有されることが好ましい。

【0077】なお、本発明の有機電界発光素子の発光層中には、本発明の有機イリジウム錯体の1種が単独で含まれていても良く、2種以上が含まれていても良い。

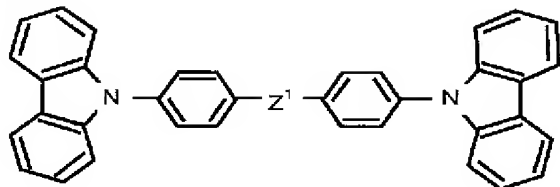
【0078】以下に、本発明に好適なこの有機イリジウム錯体のホスト化合物について説明する。

【0079】このホスト化合物は、発光層に含まれる前記一般式〔i〕で表される有機イリジウム錯体の励起三重項準位より高いエネルギー状態の励起三重項準位を有することが好ましい。また、安定な薄膜形状を与え、高いガラス転移温度(T_g)を有し、正孔および／または電子を効率良く輸送することができる化合物であることが必要である。さらに、電気化学的かつ化学的に安定であり、トラップとなったり発光を消光したりする不純物が製造時や使用時に発生しにくい化合物であることが要求される。

【0080】これらの条件を満たすホスト材料としては、例えば下記一般式(I)または(II)で表わされる化合物、もしくは下記一般式(III)で表わされる基を有する化合物が挙げられる。

【0081】

【化39】

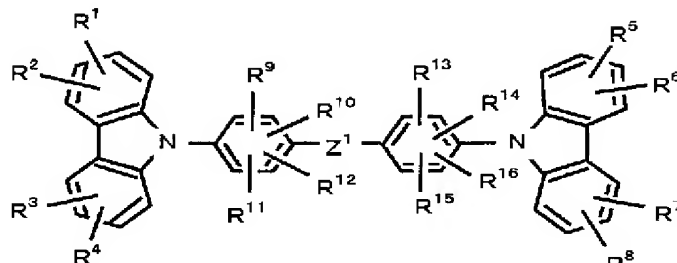


(I)

(I)式中、カルバゾリル基およびフェニレン基は任意の置換基を有していても良い。Z¹は直接結合または2価の連結基を示す。

【0082】

【化40】



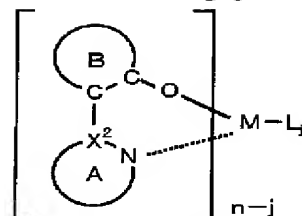
(I-1)

(I-1)式中、R¹～R¹⁶は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、R¹とR²、R³とR⁴、R⁵とR⁶、R⁷とR⁸、R⁹とR¹⁰、R¹¹とR¹²、R¹³とR¹⁴、R¹⁵とR¹⁶はそれぞれ互

※50

36

*

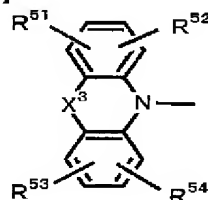


(II)

(II)式中、Mは周期律表1族、2族、3族、12族、または13族から選ばれる金属を表わし、nは該金属の価数を表わす。Lは任意の置換基を表わし、jは置換基Lの数を表わし0または1である。X²は炭素原子または窒素原子を表わす。環Aは含窒素複素環を示し、置換基を有していても良い。環Bは芳香族炭化水素環または芳香族複素環を示し、置換基を有していても良い。

【0083】

【化41】



(III)

(III)式中、R⁵¹～R⁵⁴は各々独立に、水素原子または任意の置換基を表わし、R⁵¹とR⁵²、R⁵³とR⁵⁴はそれぞれ結合して環を形成していても良い。X³は酸素原子または硫黄原子を示す。

【0084】前記一般式(I)で表わされるN-フェニルカルバゾール骨格を有する化合物として、好ましくは下記一般式(I-1)で表わされる化合物が挙げられる。

【0085】

【化42】

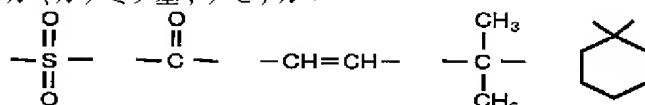
*

※いに結合して環を形成しても良い。Z¹は直接結合または2価の連結基を示す。

【0086】(I-1)式中のR¹～R¹⁶として、具体的には水素原子；塩素原子、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；カルボキシ

基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基等のアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基が挙げられる。

【0087】前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有し得る置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のアルキルアミノ基；アセチル*



置換基を有していても良い2価の芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基、または、以下の連結基のいずれかが挙げられる。

*基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

【0088】なお、上述の置換基のうち、炭素数1～6のアルキル基、アルコキシ基、アルコキシカルボニル基等は、直鎖であっても分岐していても良い。以下の置換基の例示においても同様である。

【0089】また、 R^1 と R^2 、 R^3 と R^4 、 R^5 と R^6 、 R^7 と R^8 、 R^9 と R^{10} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} はそれぞれ隣接する置換基同士で結合し、ベンゼン環、シクロヘキサン環等の5～7員環を形成していても良い。

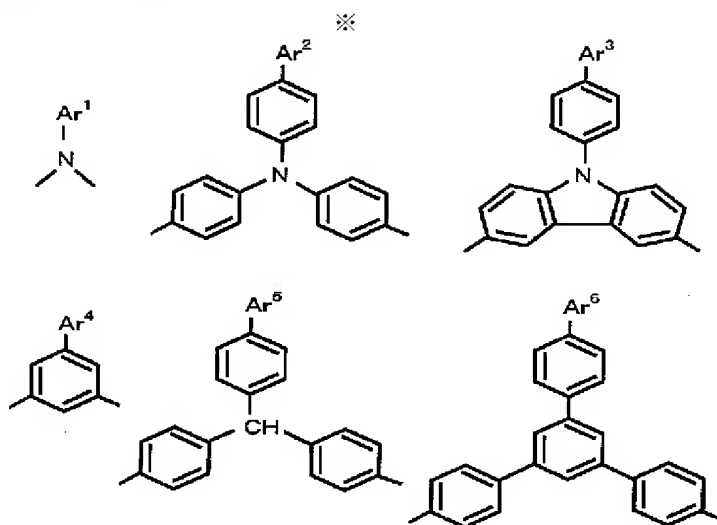
【0090】 R^1 ないし R^{16} として特に好ましいのは、水素原子、アルキル基、またはシアノ基である。

【0091】一般式 (I) または (I-1) における Z^1 として、好ましくは直接結合、酸素原子、硫黄原子、以下に示す連結基、

【化43】

※【0092】

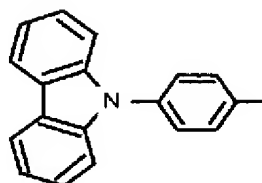
【化44】



(上記構造中のベンゼン環部分は、いずれも任意の置換基を有していても良く、また $Ar^1 \sim Ar^6$ は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基、または以下の一般式 (I-2) で表される基が挙げられる。

【0093】

【化45】



(I-2)

★なお、式 (I-2) 中におけるカルbazリル基およびフェニレン基は、任意の置換基を有していても良い。) 40

【0094】一般式 (I) または (I-1) における Z^1 の好ましい連結基のうち、芳香族炭化水素環基としては、フェニレン基、ナフチレン基、アントラニル基、ナフタセン基等の、5～6員環の単環または2～4縮合環が挙げられ、芳香族複素環基としては、2価のチオフェン環残基、フラン環残基、ピリジン環残基、ピリミジン環残基またはキノリン環残基等の、5～6員環の単環または2～3縮合環が挙げられる。

【0095】これらの芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基は、メチル基、エチル基等の炭素数1～6のア

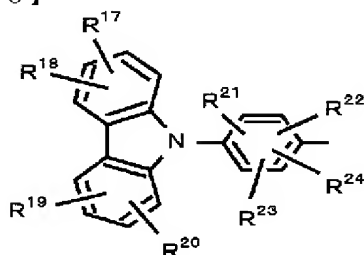
ルキル基、フッ素原子等のハロゲン原子、トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基等の置換基を有しても良い。

【0096】また、 $Ar^1 \sim Ar^6$ としては、フェニル基、ナフチル基、アントラニル基、ナフタセニル基等の、5～6員環の単環または2～4縮合環である芳香族炭化水素環基、またはチエニル基、フリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、キノリル基等の、5～6員環の単環または2～3縮合環である芳香族複素環基が挙げられる。これらの芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基は、メチル基、エチル基等のアルキル基、フッ素原子等のハロゲン原子、トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基等の置換基を有しても良い。

【0097】前記式(I-2)で表わされる構造は、好ましくは下記式(I-3)で表わされる。

【0098】

【化46】



(I-3)

((I-3)式中、 $R^{17} \sim R^{24}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、置換基を有していても良いアミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、 R^{17} と R^{18} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{23} と R^{24} はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。)

【0099】上記(I-3)式において、 $R^{17} \sim R^{24}$ として、具体的には、水素原子、塩素原子、フッ素原子等

のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基等のアラルキルアミノ基；アシル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；カルボキシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基が挙げられる。

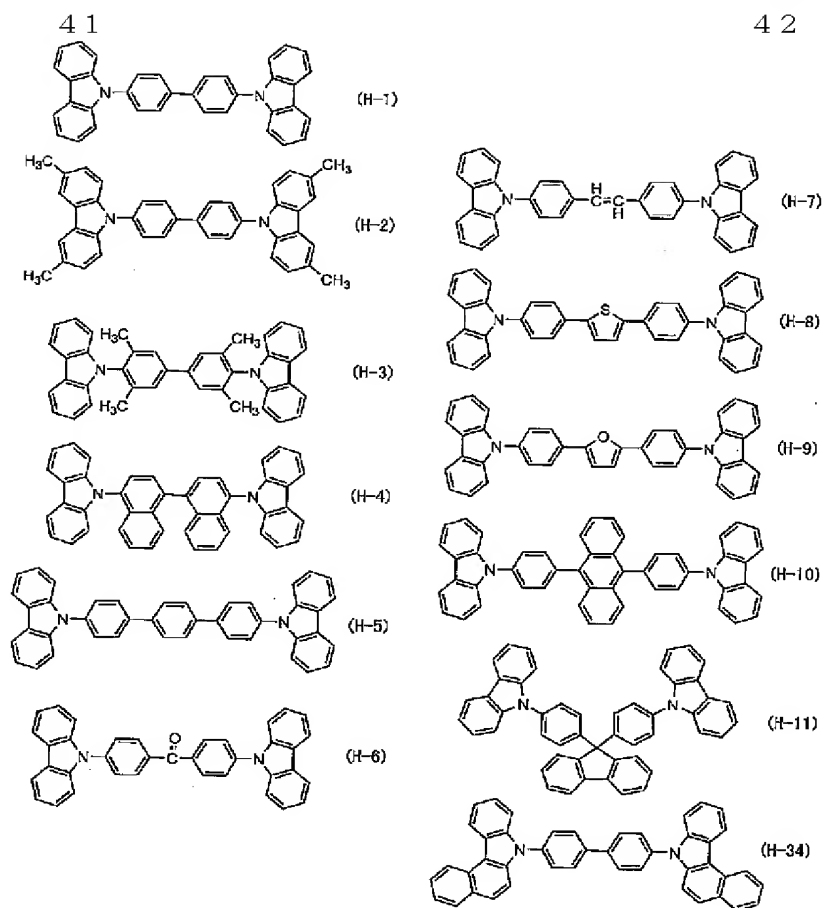
【0100】前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有し得る置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

【0101】なお R^{17} と R^{18} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{23} と R^{24} はそれぞれ隣接する置換基同士で結合し、ベンゼン環やシクロヘキササン環等の5～7員環を形成していても良い。

【0102】前記一般式(I)で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

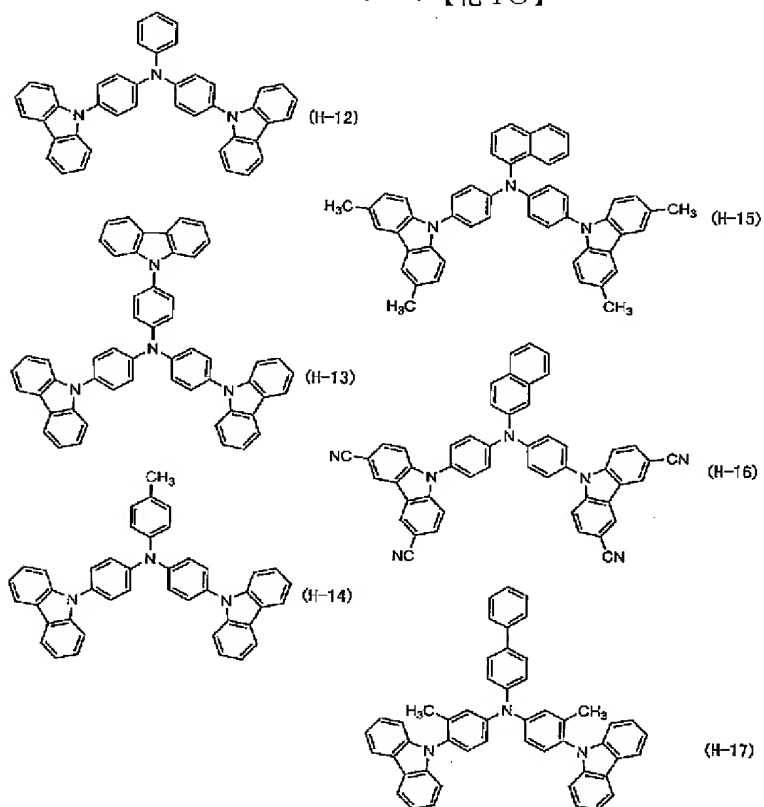
【0103】

【化47】



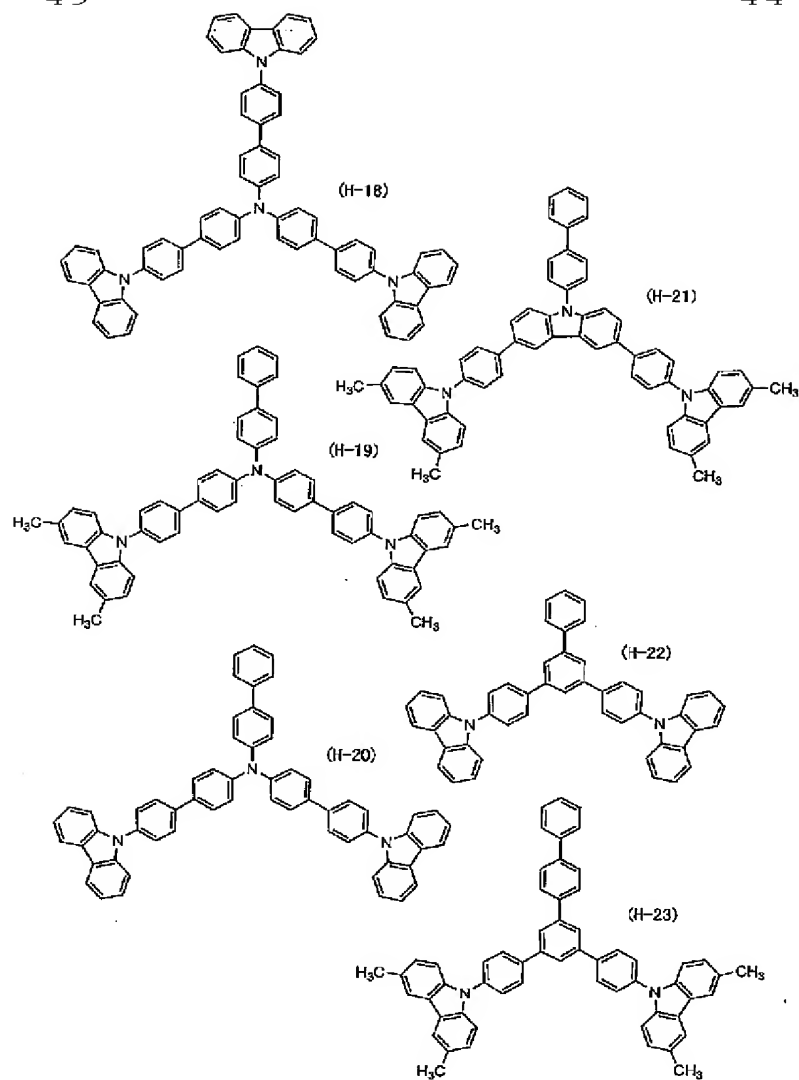
【0104】

* * 【化48】



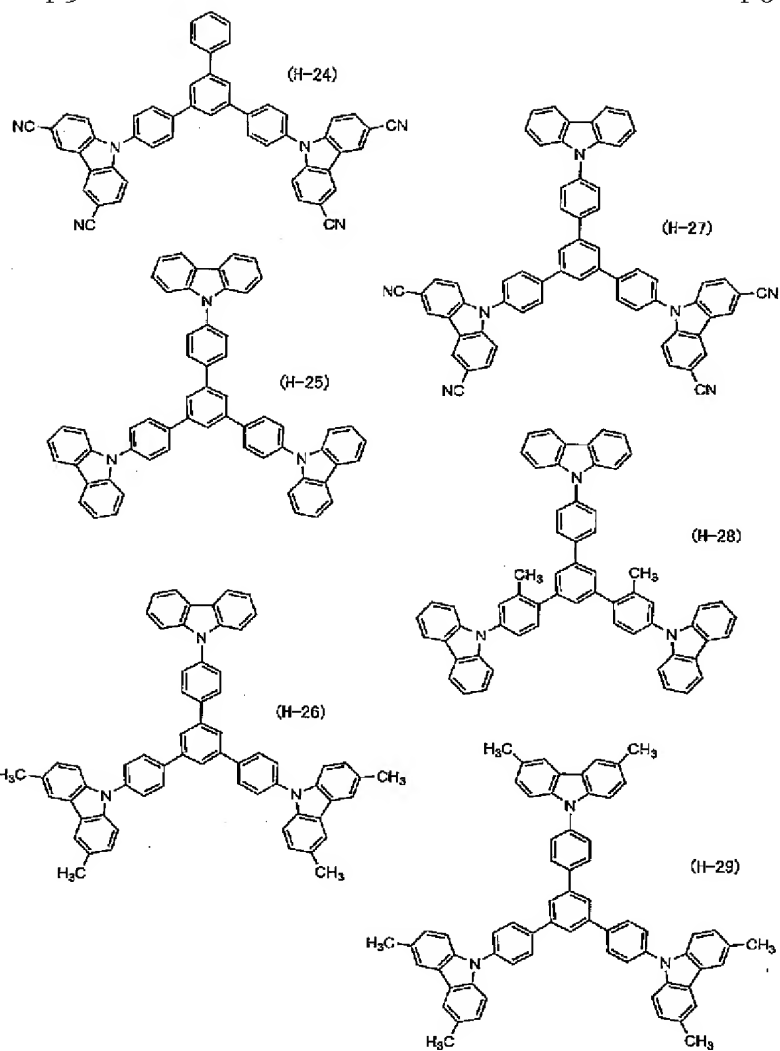
【0105】

※50※ 【化49】



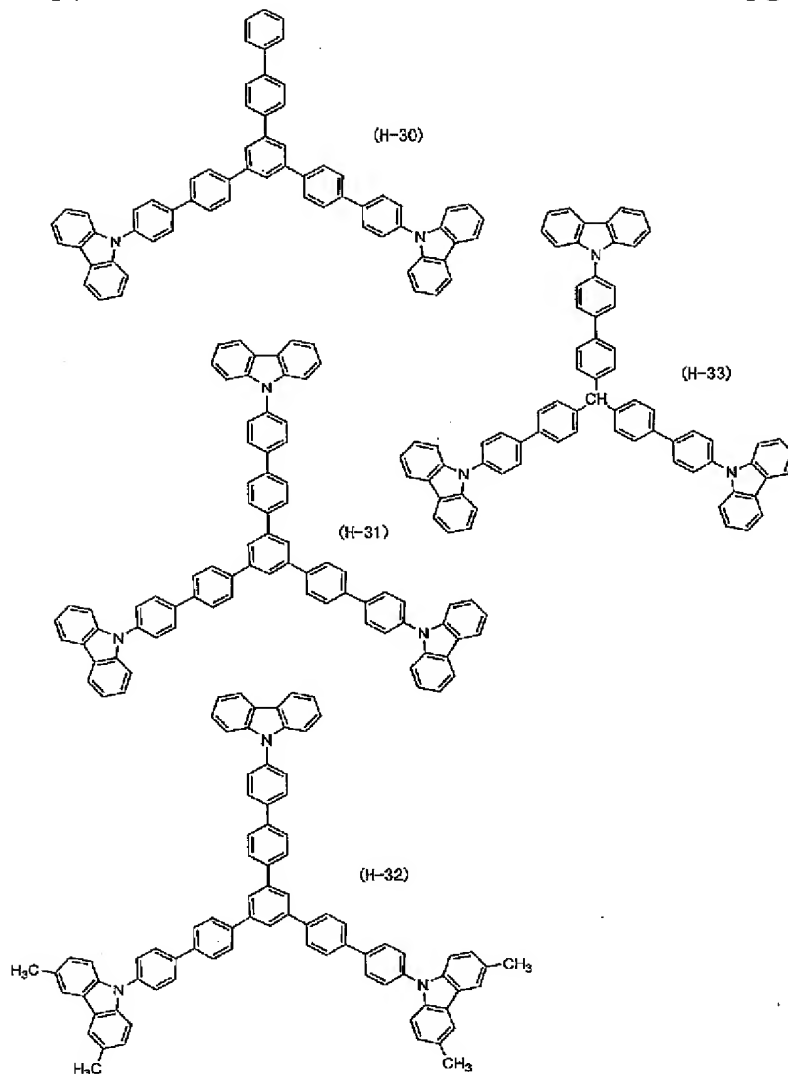
【0106】

* * 【化50】



【0107】

* * 【化51】

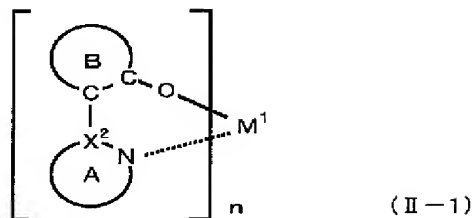


【0108】前記一般式(II)で表わされるホスト化合物としては、特に下記一般式(II-1)で表わされる有機金属錯体や、下記一般式(II-2)で表わされる混合配位子錯体、または下記一般式(II-3)で表わされる二核金属錯体が好ましい。

【0109】

【化52】

【有機金属錯体】

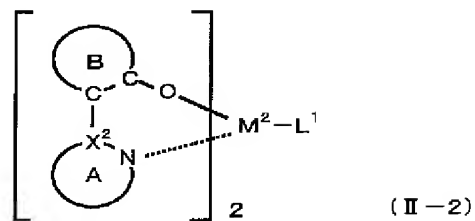


((II-1) 式中、 M^1 は1ないし3価の金属を表わし、 n 、 X^2 、環Aおよび環Bは一般式(II)におけると同義である。)

【0110】

*【化53】

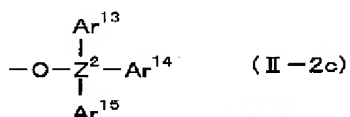
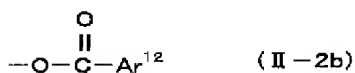
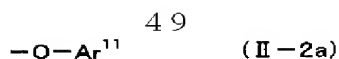
【混合配位子錯体】



((II-2) 式中、 M^2 は3価の金属を表わし、 X^2 、環Aおよび環Bは一般式(II)におけると同義である。
 L^1 は下記一般式(II-2a)、(II-2b)または(II-2c)を表わす。)

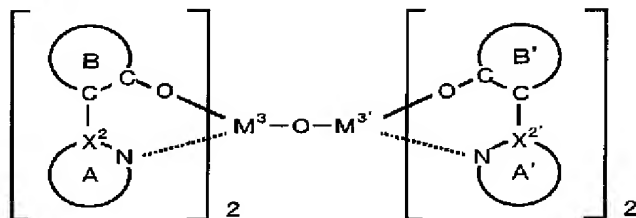
【0111】

【化54】



[2核金属錯体]

*

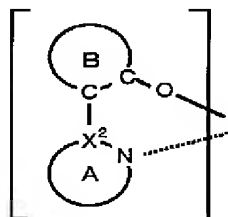


(II-3)

((II-3) 式中、M³ および M³' は3価の金属を表わし、X²、環A及び環Bは一般式(II)におけると同義であり、X²' はX²と、環A' は環Aと、また環B' は環Bとそれぞれ同義である。)

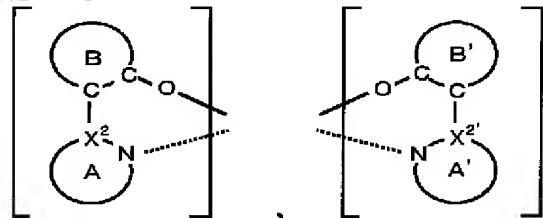
【0113】なお、一般式(II)および(II-1)～(II-3)で表わされる化合物1分子中に含まれる、複数の下記構造部分

【化56】



(一般式(II-3)においては、1化合物中に2個ずつ存在する下記構造部分

【化57】



)、即ち環A、環B、およびX² (式(II-3)の場合は、環A、環A'、環B、環B'、X² およびX²') は、同じであっても良いし、異なっても良い。合成が容易である点からは、すべて同じであることが好ましい。

【0114】同様に、一般式(II-3)で表わされる化合物におけるM³ およびM³' も、同じであっても異なっても良く、合成が容易である点からは、同じであ

* ((II-2a)、(II-2b)、(II-2c) 式中、Ar¹¹～Ar¹⁵ は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表わし、Z² はシリコンまたはゲルマニウムを表わす。)

【0112】

【化55】

※ることが好ましい。

【0115】前記一般式(II)および(II-1)～(II-3)で表わされる化合物の環A、環A'、環B、および環B' は、それぞれ下記のものから選ばれるものが好ましい。

【0116】[環Aおよび環A'] 置換基を有していても良い5員環または6員環の含窒素芳香族複素環であり、該環に5または6員環の芳香族炭化水素環または芳香族複素環が1または2個縮合して縮合環を形成しても良い。

[環Bおよび環B'] 置換基を有していても良い6員環の芳香族炭化水素環または芳香族複素環であり、該環に5または6員環の芳香族炭化水素環または芳香族複素環が1または2個縮合して縮合環を形成しても良い。

【0117】前記一般式(II)および(II-1)～(II-3)で表わされる化合物の環A、環A'、環B、および環B' として、より好ましくは各々単環であり、中でもそれぞれ下記から選ばれる環が好ましい。

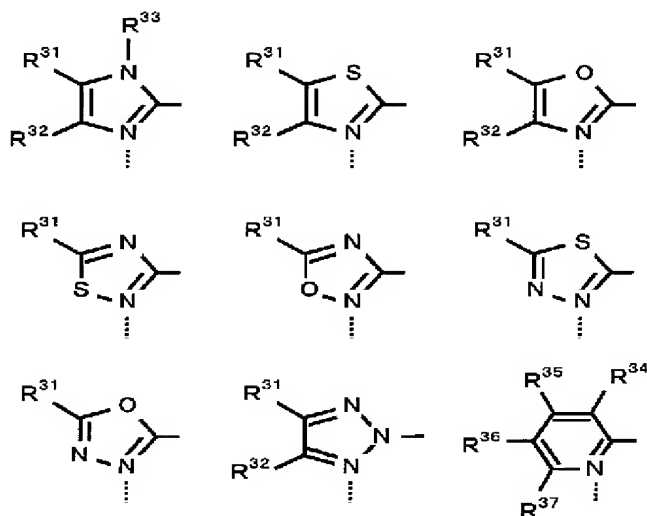
【0118】[環Aおよび環A'] それぞれ置換基を有していても良い、ジアゾール環、チアゾール環、オキサゾール環、チアジアゾール環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、ピリジン環、ジアジン環、トリアジン環

【0119】さらに前記一般式(II)および(II-1)～(II-3)で表わされる化合物の環A、環A'、環B、および環B' は、それぞれ下記構造式から選ばれることが最も好ましい。

【0120】

【化58】

[環Aおよび環A']



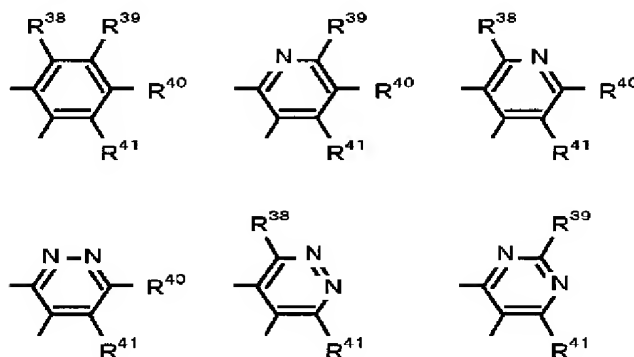
(式中、 $R^{31} \sim R^{37}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化*

[環Bおよび環B']

* 水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表わし、 R^{31} と R^{32} 、 R^{31} と R^{33} 、 R^{34} と R^{35} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。)

【0121】

【化59】



(式中、 $R^{38} \sim R^{41}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表わし、 R^{38} と R^{39} 、 R^{39} と R^{40} 、 R^{40} と R^{41} はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。)

【0122】なお上記「環Bおよび環B'」の構造における2本の結合手は、前記式(II)および(II-1)～(II-3)における環Bおよび環B' 構造の定義を満たす限り、酸素原子、または環Aおよび環A' における原子X2、X2' のうち、いずれがいずれに結合していても良い。

※50

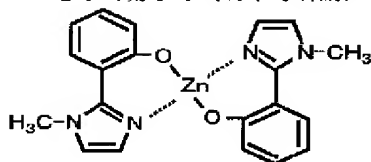
※【0123】 $R^{31} \sim R^{41}$ として、具体的には水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；カルボキシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基；ジフェネチルアミノ基等のジアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わす。

【0124】前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素

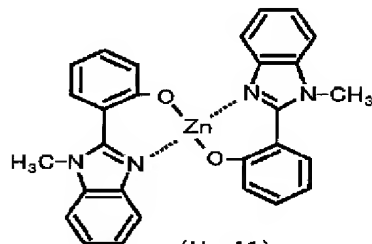
環基が有し得る置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

【0125】なお、 R^{31} と R^{32} 、 R^{31} と R^{33} 、 R^{34} と R^{35} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} 、 R^{38} と R^{39} 、 R^{39} と R^{40} 、 R^{40} と R^{41} がそれぞれ隣接する基同士で結合して形成する環としては、ベンゼン環、またはシクロヘキサン環等が挙げられる。

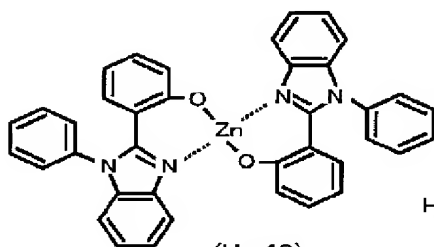
【0126】 $R^{31} \sim R^{41}$ として好ましくは、水素原*



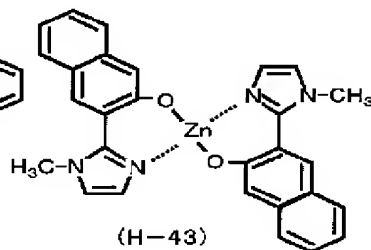
(H-40)



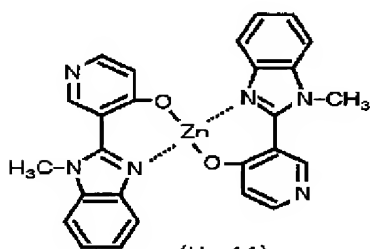
(H-41)



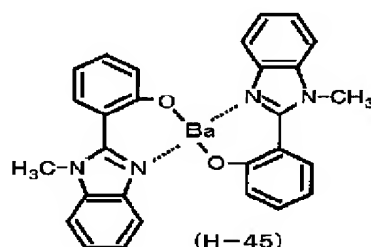
(H-42)



(H-43)



(H-44)



(H-45)

【0130】

※ ※【化61】

*子、ハロゲン原子、アルキル基、アルコキシ基、ハロアルキル基または置換基を有していても良い芳香族炭化水素基であるか、または隣接する基同士で結合して環を形成する。

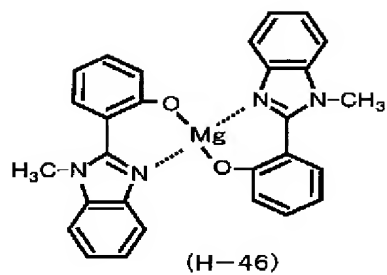
【0127】一般式(II)および(II-1)～(II-3)で表わされる化合物の金属M(M^1 、 M^2 、 M^3 および $M^{3'}$)は、周期律表1族、2族、3族、12族、13族から選ばれる金属であれば特に限定されないが、好ましくは亜鉛、アルミニウム、ガリウム、ベリリウム、およびマグネシウムが挙げられる。

【0128】前記一般式(II)および(II-1)～(II-3)で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

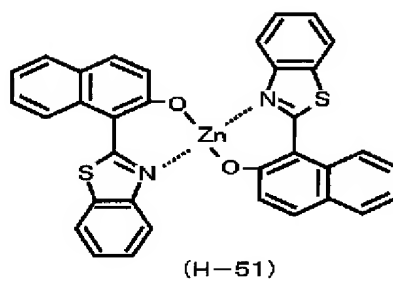
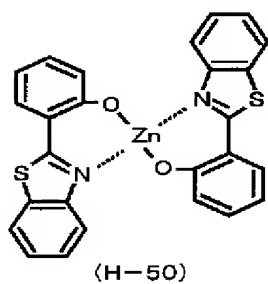
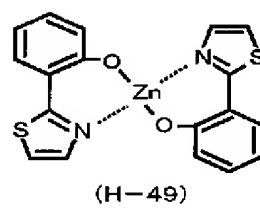
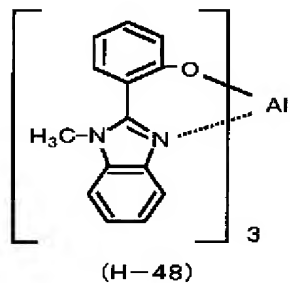
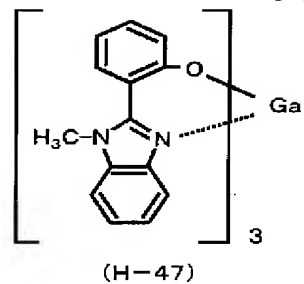
【0129】

【化60】

55



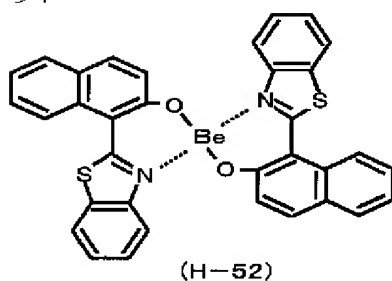
56



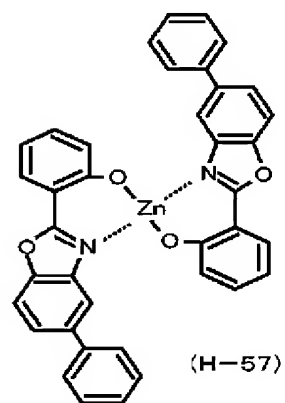
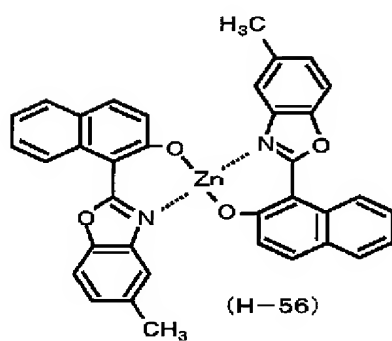
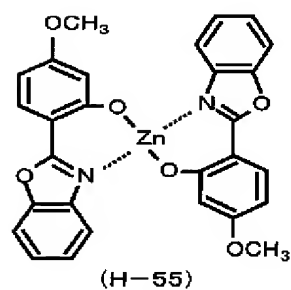
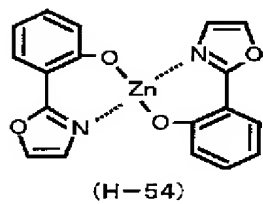
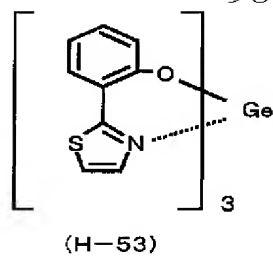
【0131】

* * 【化62】

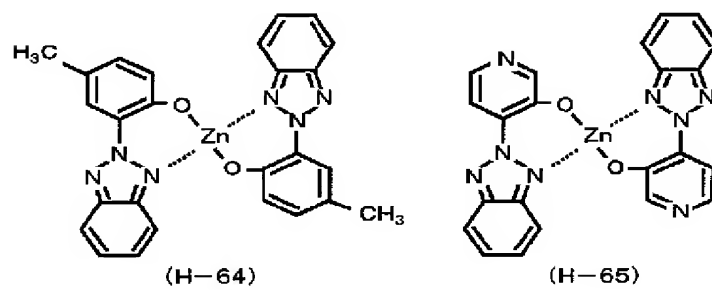
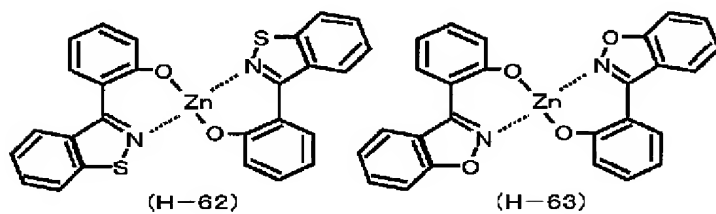
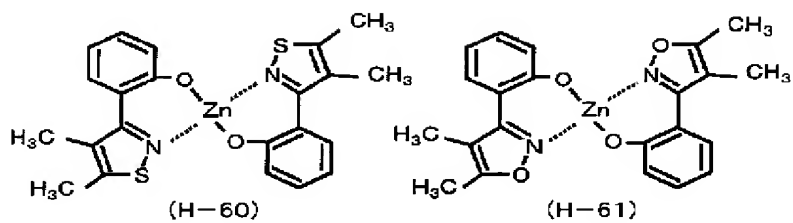
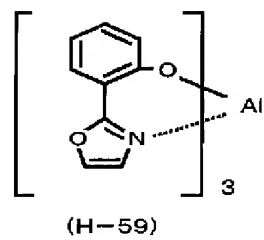
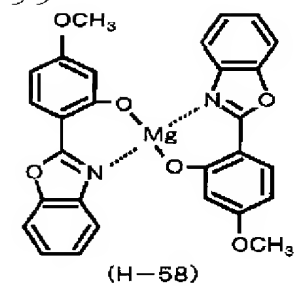
57



58



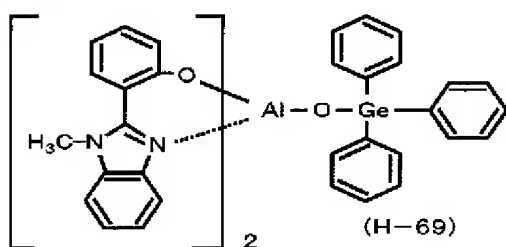
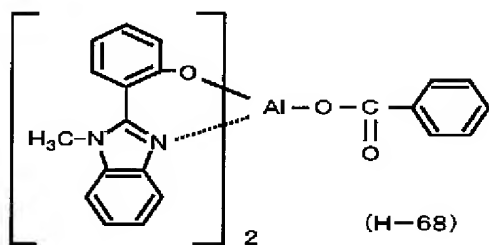
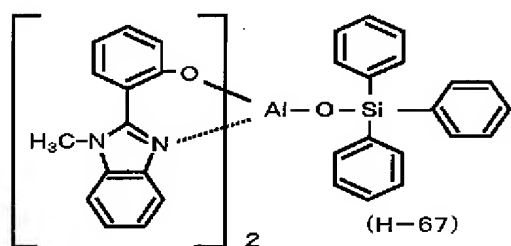
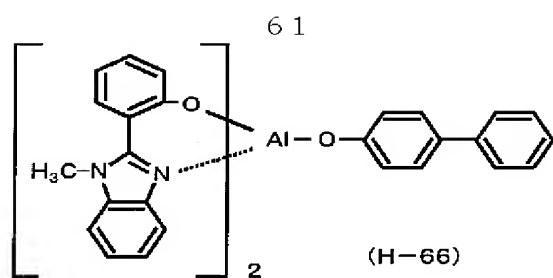
59

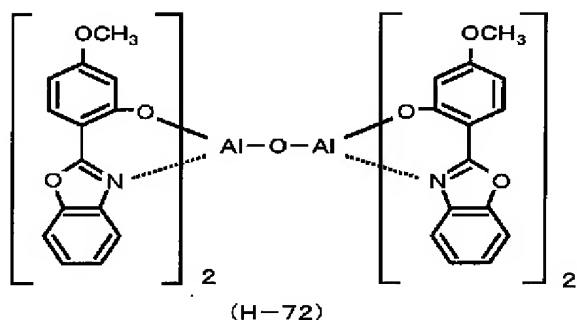
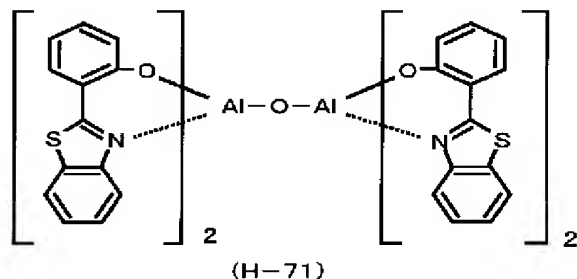
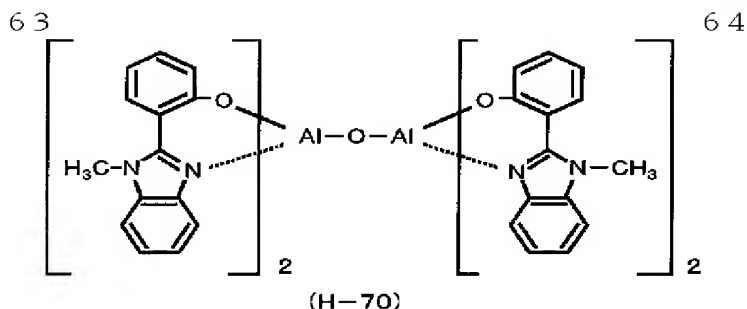


【0133】
【化64】

【0134】

【化65】





【0135】前記一般式(III)において、 R^{51} と R^{52} 、 R^{53} と R^{54} がそれぞれ結合して形成する環としては、ベンゼン環やシクロヘキサン環が挙げられる。

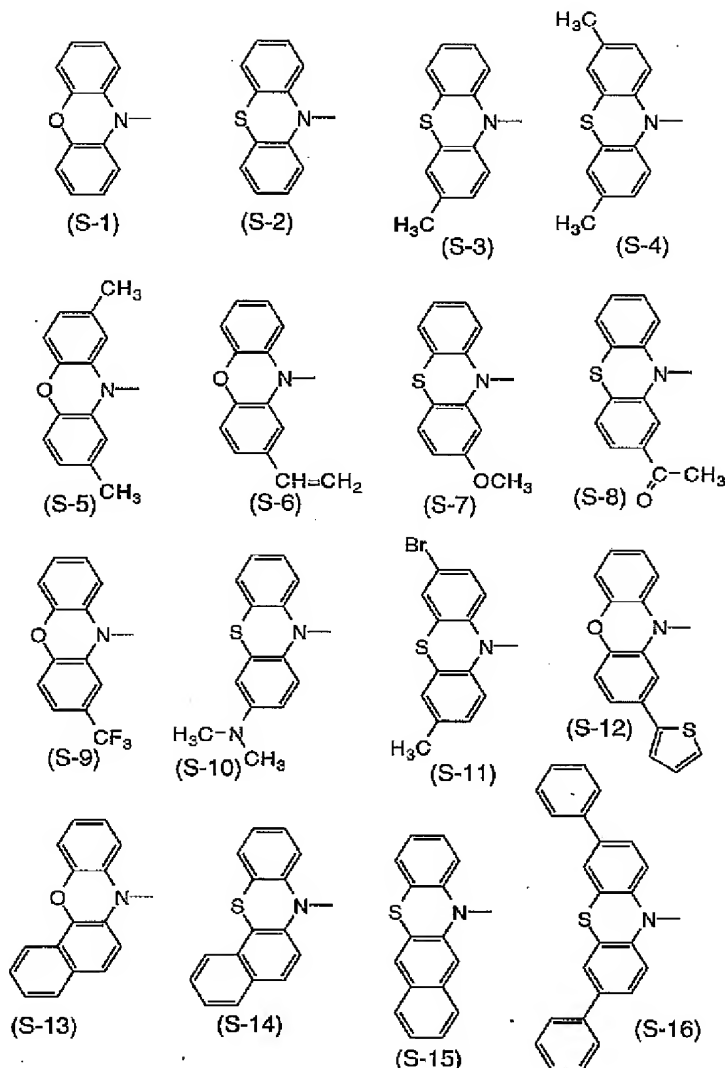
【0136】前記一般式(III)において、 $R^{51} \sim R^{54}$ は、具体的には、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジロキシ基等のアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基等のジアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香*

*族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わし、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジロキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基が挙げられる。

【0137】前記一般式(III)で表わされる基の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

【0138】

【化66】



【0139】前記一般式(III)で表される基を有する化合物は、低分子であっても高分子であっても良い。高分子の場合は、主鎖に含有されていても良いし、また、側鎖として含有されていても良い。

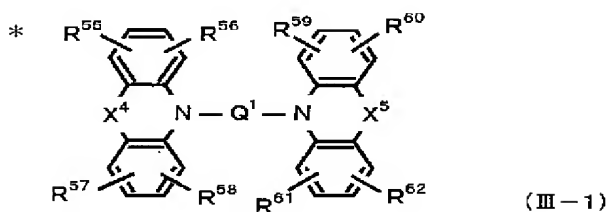
【0140】この化合物は分子量400～1200程度の低分子化合物である場合が好ましく、一般式(III)で表される基を有する化合物は、化合物全体としての環の合計数が6～20であるのが好ましく、より好ましくは7～18である。また、一般式(III)で表される基を有する化合物は、分子内に一般式(III)で表される単位を2～3個有している化合物が好ましい。

【0141】中でも、一般式(III)で表される基は、前記(S-1)あるいは(S-2)であるのが特に好ましい。

【0142】一般式(III)で表される基を有する化合物は、下記一般式(III-1)または(III-2)で表される化合物であることが好ましい。

【0143】

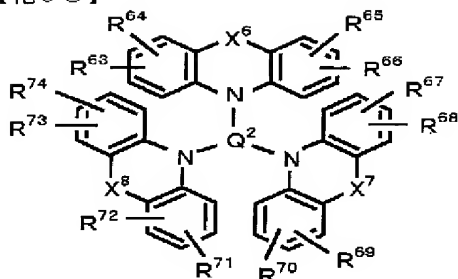
【化67】



(式中、R⁵⁵～R⁶²は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、アリル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシ基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、 α -ハロアルキル基、水酸基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、R⁵⁵とR⁵⁶、R⁵⁷とR⁵⁸、R⁵⁹とR⁶⁰、R⁶¹とR⁶²はそれぞれ互いに結合して環を形成しても良い。X⁴およびX⁵は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示し、Q¹は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる2価の連結基を示す。)

* 50 【0144】

【化68】



(III-2)

(式中、 $R^{63} \sim R^{74}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、アリル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシ基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、 α -ハロアルキル基、水酸基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表わし、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{69} と R^{70} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{73} と R^{74} はそれぞれ互いに結合して環を形成しても良い。 $X^6 \sim X^9$ は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示し、 Q^2 は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる3価の連結基を示す。)

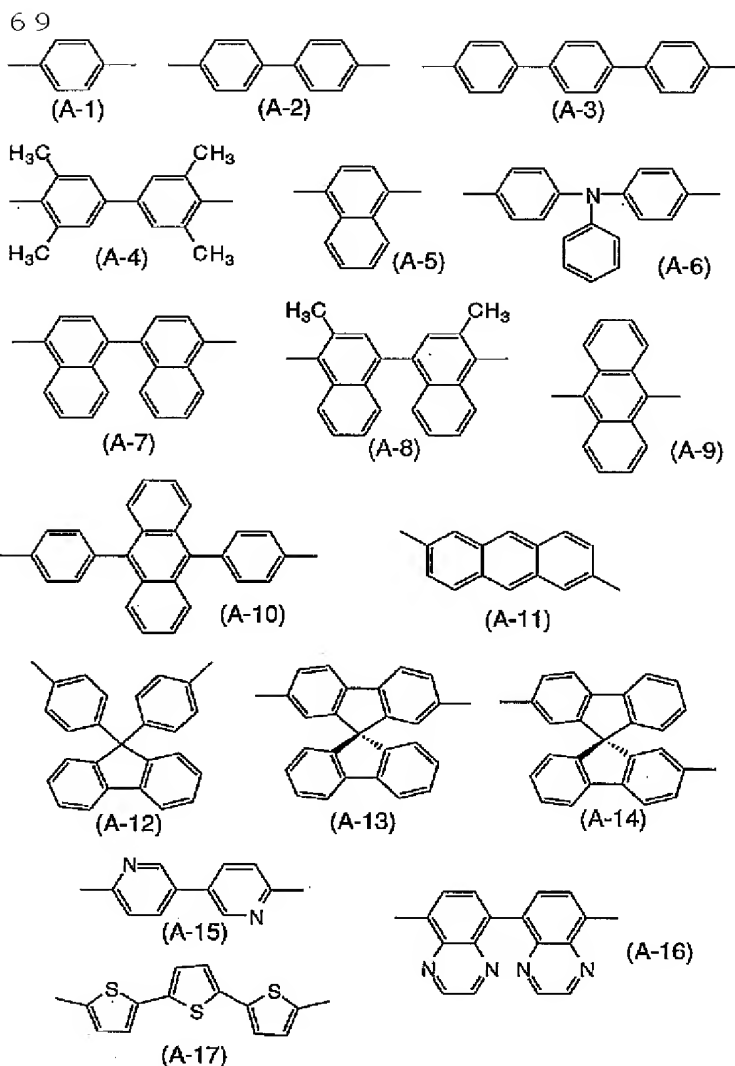
【0145】前記一般式(III-1)において、 $R^{55} \sim R^{62}$ は各々独立に、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジロキシ基等のアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基等のジアルキルアミノ基；

トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わし、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジロキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基などが挙げられる。 R^{55} と R^{56} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{59} と R^{60} 、 R^{61} と R^{62} はそれぞれ結合して、ベンゼン環、シクロヘキサン環等を形成しても良い。 $X^4 \sim X^5$ は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示す。 Q^1 は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる2価の連結基を示し、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジロキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基などが挙げられる。

【0146】連結基 Q^1 の好ましい例を以下に示す。

【0147】

【化69】

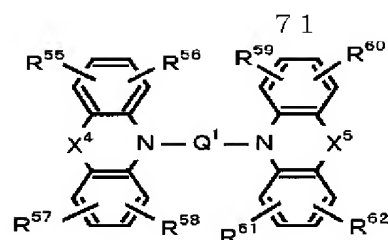


【0148】これらの中でも、連結基 Q^1 は、(A-2)、(A-6)、(A-8)、(A-10)あるいは(A-12)が好ましい。そして、これら連結基 Q^1 を有し、環構造として(S-1)または(S-2)を有する化合物であるものが最も好ましい。

【0149】前記一般式(III-1)で表わされる化合物の好ましい具体例を表1、2に示すが、これらに限定するものではない。

【0150】

【表1】



化合物番号	R ⁵⁵ ~R ⁵⁸ 置換部分	R ⁵⁹ ~R ⁶² 置換部分	連続基Q ¹
(H-101)	(S-1)	(S-1)	(A-1)
(H-102)	(S-2)	(S-2)	(A-1)
(H-103)	(S-1)	(S-1)	(A-2)
(H-104)	(S-2)	(S-2)	(A-2)
(H-105)	(S-3)	(S-3)	(A-2)
(H-106)	(S-1)	(S-2)	(A-2)
(H-107)	(S-4)	(S-4)	(A-2)
(H-108)	(S-5)	(S-5)	(A-2)
(H-109)	(S-6)	(S-6)	(A-2)
(H-110)	(S-7)	(S-7)	(A-2)
(H-111)	(S-8)	(S-8)	(A-2)
(H-112)	(S-2)	(S-9)	(A-2)
(H-113)	(S-10)	(S-10)	(A-2)
(H-114)	(S-11)	(S-11)	(A-2)
(H-115)	(S-12)	(S-12)	(A-2)
(H-116)	(S-13)	(S-13)	(A-2)
(H-117)	(S-13)	(S-2)	(A-2)
(H-118)	(S-14)	(S-14)	(A-2)
(H-119)	(S-13)	(S-14)	(A-2)
(H-120)	(S-15)	(S-15)	(A-2)
(H-121)	(S-2)	(S-16)	(A-2)
(H-122)	(S-16)	(S-16)	(A-2)
(H-123)	(S-1)	(S-1)	(A-3)
(H-124)	(S-2)	(S-2)	(A-3)
(H-125)	(S-1)	(S-1)	(A-4)
(H-126)	(S-2)	(S-2)	(A-4)
(H-127)	(S-2)	(S-2)	(A-5)

【0151】

【表2】

72

化合物番号	R ⁵⁵ ~R ⁵⁸ 置換部分	R ⁵⁹ ~R ⁶² 置換部分	連続基Q ¹
(H-128)	(S-1)	(S-1)	(A-6)
(H-129)	(S-2)	(S-2)	(A-6)
(H-130)	(S-3)	(S-3)	(A-6)
(H-131)	(S-1)	(S-1)	(A-7)
(H-132)	(S-2)	(S-2)	(A-7)
(H-133)	(S-1)	(S-1)	(A-8)
(H-134)	(S-2)	(S-2)	(A-8)
(H-135)	(S-3)	(S-3)	(A-8)
(H-136)	(S-1)	(S-1)	(A-9)
(H-137)	(S-2)	(S-2)	(A-9)
(H-138)	(S-1)	(S-1)	(A-10)
(H-139)	(S-2)	(S-2)	(A-10)
(H-140)	(S-1)	(S-2)	(A-10)
(H-141)	(S-3)	(S-3)	(A-10)
(H-142)	(S-4)	(S-4)	(A-10)
(H-143)	(S-7)	(S-7)	(A-10)
(H-144)	(S-10)	(S-10)	(A-10)
(H-145)	(S-13)	(S-13)	(A-10)
(H-146)	(S-14)	(S-14)	(A-10)
(H-147)	(S-1)	(S-2)	(A-11)
(H-148)	(S-2)	(S-2)	(A-11)
(H-149)	(S-1)	(S-1)	(A-12)
(H-150)	(S-2)	(S-2)	(A-12)
(H-151)	(S-2)	(S-2)	(A-13)
(H-152)	(S-2)	(S-2)	(A-14)
(H-153)	(S-2)	(S-2)	(A-15)
(H-154)	(S-1)	(S-1)	(A-16)
(H-155)	(S-2)	(S-2)	(A-17)

【0152】前記一般式(III-2)において、R⁶³~R⁷⁴は各々独立に、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1~6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基等のジアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のα-ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わし、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1~6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基などが挙げ

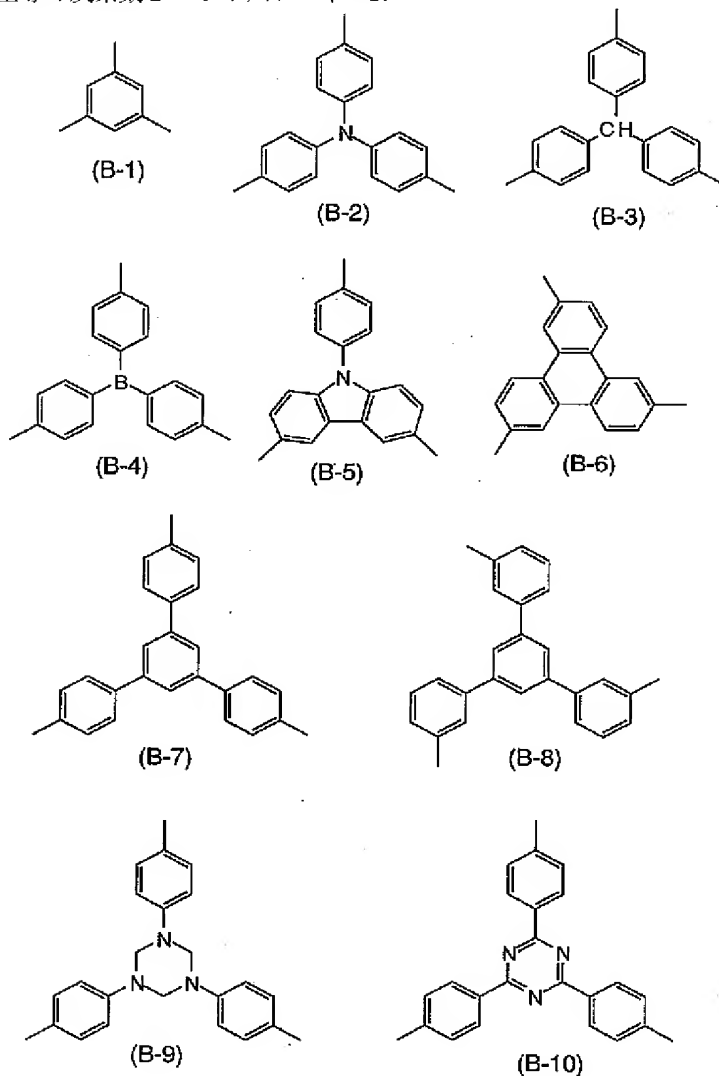
られる。R⁶³とR⁶⁴、R⁶⁵とR⁶⁶、R⁶⁷とR⁶⁸、R⁶⁹とR⁷⁰、R⁷¹とR⁷²、R⁷³とR⁷⁴はそれぞれ互いに結合して、ベンゼン環、シクロヘキサン環等を形成していても良い。X⁶～X⁸は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示す。Q²は置換基を有していても良い芳香族芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる3価の連結基を示し、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキ*10

*シカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基などが挙げられる。

【0153】連結基Q²の好ましい例を以下に示す。

【0154】

【化70】



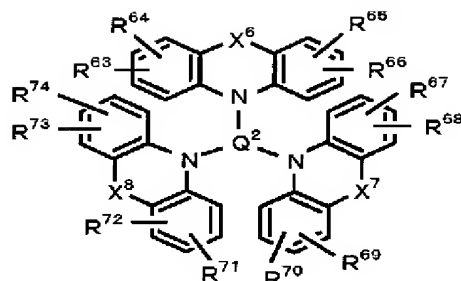
【0155】これらの中でも連結基Q²は、(B-1)、(B-2)あるいは(B-7)が好ましい。最も好ましくは、これら連結基を有し、環構造として(S-1)または(S-2)を有する場合である。

【0156】前記一般式(III-2)で表わされる化合物 ※

※物の好ましい具体例を表3、4に示すが、これらに限定するものではない。

【0157】

【表3】



化合物番号	R ⁶³ ~R ⁶⁶ 置換部分	R ⁶⁷ ~R ⁷⁰ 置換部分	R ⁷¹ ~R ⁷⁴ 置換部分	連続基Q ²
(H-201)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-1)
(H-202)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-1)
(H-203)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-2)
(H-204)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-2)
(H-205)	(S-3)	(S-3)	(S-3)	(B-2)
(H-206)	(S-1)	(S-1)	(S-2)	(B-2)
(H-207)	(S-4)	(S-4)	(S-4)	(B-2)
(H-208)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-2)
(H-209)	(S-14)	(S-14)	(S-14)	(B-2)
(H-210)	(S-15)	(S-15)	(S-15)	(B-2)
(H-211)	(S-16)	(S-16)	(S-16)	(B-2)
(H-212)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-3)
(H-213)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-3)
(H-214)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-4)
(H-215)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-4)
(H-216)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-5)
(H-217)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-5)
(H-218)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-6)
(H-219)	(S-4)	(S-4)	(S-4)	(B-6)
(H-220)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-7)
(H-221)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-7)
(H-222)	(S-3)	(S-3)	(S-3)	(B-7)
(H-223)	(S-7)	(S-7)	(S-7)	(B-7)
(H-224)	(S-1)	(S-2)	(S-2)	(B-7)

【0158】

* * 【表4】

化合物番号	R ⁶³ ~R ⁶⁶ 置換部分	R ⁶⁷ ~R ⁷⁰ 置換部分	R ⁷¹ ~R ⁷⁴ 置換部分	連続基Q ²
(H-225)	(S-10)	(S-10)	(S-10)	(B-7)
(H-226)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-7)
(H-227)	(S-14)	(S-14)	(S-14)	(B-7)
(H-228)	(S-15)	(S-15)	(S-15)	(B-7)
(H-229)	(S-16)	(S-16)	(S-16)	(B-7)
(H-230)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-8)
(H-231)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-8)
(H-232)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-9)
(H-233)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-9)
(H-234)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-10)
(H-235)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-10)
(H-236)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-10)
(H-237)	(S-14)	(S-14)	(S-14)	(B-10)

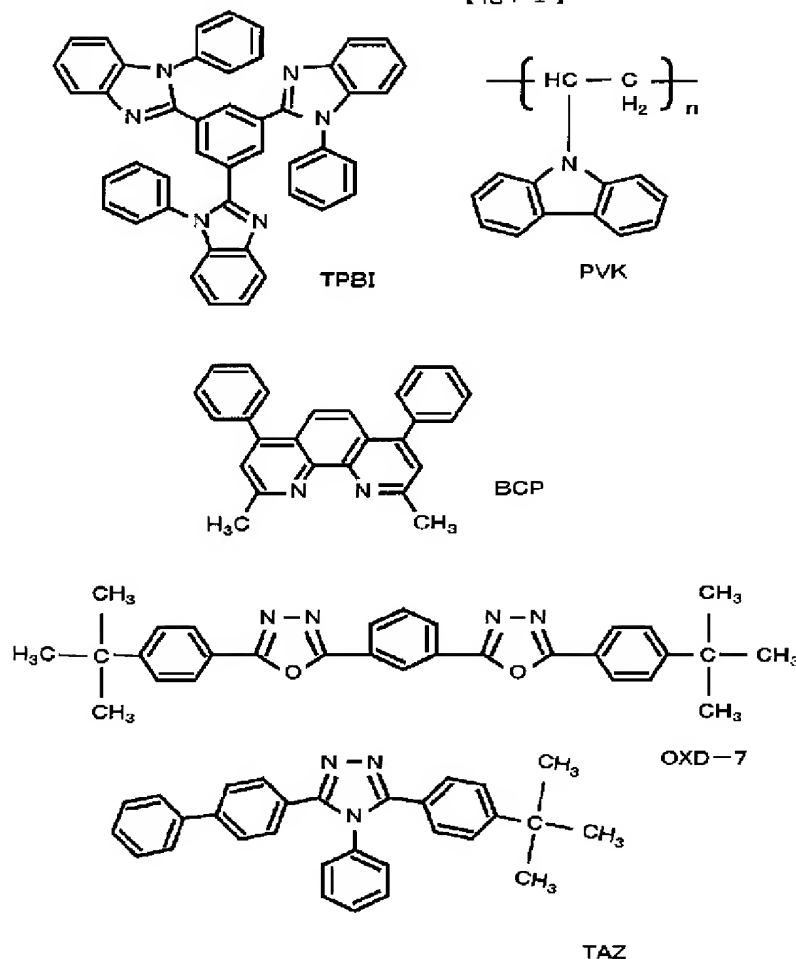
【0159】前記一般式(I)で表される化合物、前記一般式(II)で表される化合物、前記一般式(III)で表される基を有する化合物は、いずれも発光層中に1種のみが含まれていても良く、各2種以上が含まれていても良い。また、異なる一般式で表される化合物を併用し

※ても良い。

【0160】また、ホスト化合物としては、前記一般式(I)，(II)で表される化合物や前記一般式(III)で表される基を有する化合物のほか、下記化合物等を使用しても良い。

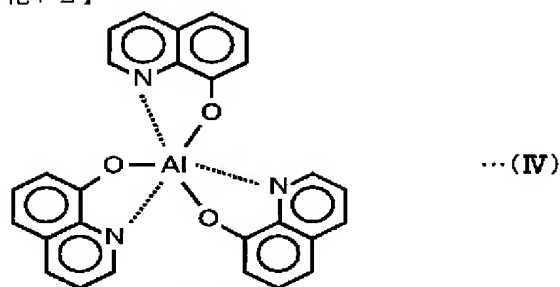
【0161】

* * 【化71】



【0162】

【化72】



(上記式 (IV) 中、配位子である 8-ヒドロキシキノリン構造は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等のハロゲン原子、あるいはメチル基、エチル基、トールキシル基等の炭素数 1~5 の直鎖または分岐のアルキル基で置換されていても良い。なお、1 化合物中の 3 個の配位子は、同じ構造であっても異なっても良い。)

【0163】ホスト化合物は、前述したように、同じ一般式で表わすことができる化合物を複数種併用しても良いし、また同じ一般式では表わせない化合物を 2 種以上併用しても良い。これらホスト化合物の中では、前記一※50

30※一般式 (I) で表される化合物が最も好ましい。

【0164】本発明の有機電界発光素子において、発光層のホスト化合物として最も好ましいのは前記一般式 (I) で表わされる化合物である。

【0165】次に、本発明の有機電界発光素子の構造について、図面を参照しながら説明するが、本発明の有機電界発光素子の構造は何ら図示のものに限定されるものではない。

【0166】図 1~3 は本発明の有機電界発光素子の実施の形態を模式的に示す断面図であり、1 は基板、2 は陽極、3 は陽極バッファ層、4 は正孔輸送層、5 は発光層、6 は正孔阻止層、7 は電子輸送層、8 は陰極を各々表わす。以下、図 1 に示す素子を中心に説明する。

【0167】基板 1 は有機電界発光素子の支持体となるものであり、石英やガラスの板、金属板や金属箔、プラスチックフィルムやシートなどが用いられる。特にガラス板や、ポリエステル、ポリメタクリレート、ポリカーボネート、ポリスルホン等の透明な合成樹脂の板が好ましい。合成樹脂基板を使用する場合にはガスバリア性に留意する必要がある。基板のガスバリア性が小さすぎると、基板を通過した外気により有機電界発光素子が劣化

することがあるので好ましくない。このため、合成樹脂基板の少なくとも片面に緻密なシリコン酸化膜等を設けてガスバリア性を確保する方法も好ましい方法の一つである。

【0168】基板1上には陽極2が設けられる。陽極2は正孔輸送層4への正孔注入の役割を果たすものである。この陽極2は、通常、アルミニウム、金、銀、ニッケル、パラジウム、白金等の金属、インジウムおよび／またはスズの酸化物等の金属酸化物、ヨウ化銅等のハロゲン化金属、カーボンブラック、あるいは、ポリ(3-メチルチオフェン)、ポリピロール、ポリアニリン等の導電性高分子などにより構成される。陽極2の形成は通常、スパッタリング法、真空蒸着法などにより行われることが多い。また、銀等の金属微粒子、ヨウ化銅等の微粒子、カーボンブラック、導電性の金属酸化物微粒子、導電性高分子微粉末などを用いる場合には、適当なバインダー樹脂溶液に分散し、基板1上に塗布することにより陽極2を形成することもできる。さらに、導電性高分子の場合は、電解重合により直接基板1上に薄膜を形成したり、基板1上に導電性高分子を塗布して陽極2を形成することもできる(Appl. Phys. Lett., 60巻, 2711頁, 1992年)。

【0169】また、陽極2は異なる材料からなる層を、積層して形成された積層構造であっても良い。

【0170】陽極2の厚みは、必要とする透明性により異なる。透明性が必要とされる場合は、可視光の透過率を、通常60%以上、好ましくは80%以上とすることが望ましく、この場合、厚みは、通常5~1000nm、好ましくは10~500nm程度である。不透明で良い場合は陽極2の厚みは基板1と同程度でも良い。また、さらには上記の陽極2の上に異なる導電材料を積層することも可能である。

【0171】陽極2の上には正孔輸送層4が設けられる。正孔輸送層4の材料に要求される条件としては、陽極2からの正孔注入効率が高く、かつ、注入された正孔を効率良く輸送することができる材料であることが挙げられる。そのためには、イオン化ポテンシャルが小さく、可視光の光に対して透明性が高く、しかも正孔移動度が大きく、さらに安定性に優れ、トラップとなる不純物が製造時或使用時に発生しにくいことが要求される。また、発光層5に接するために発光層5からの発光を消光したり、発光層5との間でエキサイプレックスを形成して効率を低下させないことが求められる。上記の一般的要求以外に、車載表示用の応用を考えた場合、素子にはさらに耐熱性が要求されるため、Tgとして75℃以上の値を有する材料が望ましく、特に85℃以上の値を有する材料が好ましい。

【0172】このような正孔輸送材料としては、例えば、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニルで代表される2個以上の3級アミンを含み2

個以上の縮合芳香族環が窒素原子に置換した芳香族ジアミン(特開平5-234681号公報)、4,4',4''-トリス(1-ナフチルフェニルアミノ)トリフェニルアミン等のスターバースト構造を有する芳香族アミン化合物(J. Lum. n., 72-74巻, 985頁, 1997年)、トリフェニルアミンの四量体から成る芳香族アミン化合物(Chem. Commun., 2175頁, 1996年)、2,2',7,7'-テトラキス-(ジフェニルアミノ)-9,9'-スピロビフルオレン等のスピロ化合物(Synth. Metals, 91巻, 209頁, 1997年)等が挙げられる。これらの化合物は、単独で用いても良いし、必要に応じて、各々、混合して用いても良い。

【0173】上記の化合物以外に、正孔輸送層4の材料として、ポリビニルカルバゾール、ポリビニルトリフェニルアミン(特開平7-53953号公報)、テトラフェニルベンジジンを含有するポリアリーレンエーテルサルホン(Polym. Adv. Tech., 7巻, 33頁, 1996年)等の高分子材料が挙げられる。

【0174】正孔輸送層4を塗布法で形成する場合は、正孔輸送材料の1種または2種以上に、必要により正孔のトラップにならないバインダー樹脂や塗布性改良剤等の添加剤を添加し、溶解して塗布溶液を調製し、スピンコート法等の方法により陽極2上に塗布し、乾燥して正孔輸送層4を形成する。バインダー樹脂としては、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエステル等が挙げられる。バインダー樹脂は添加量が多いと正孔移動度を低下させるので、少ない方が望ましく、通常、正孔輸送層4中の含有量で50重量%以下が好ましい。

【0175】正孔輸送層4を真空蒸着法で形成する場合には、正孔輸送材料を真空容器内に設置されたルツボに入れ、真空容器内を適当な真空ポンプで 10^{-4} Pa程度にまで排気した後、ルツボを加熱して、正孔輸送材料を蒸発させ、ルツボと向き合って置かれた、陽極2が形成された基板1上に正孔輸送層4を形成させる。

【0176】正孔輸送層4の膜厚は、通常、5~300nm、好ましくは10~100nmである。このように薄い膜を一樣に形成するためには、一般に真空蒸着法が良く用いられる。

【0177】正孔輸送層4の上には発光層5が設けられる。発光層5は、少なくとも前記一般式[i]で表される化合物(本発明の有機イリジウム錯体)を含有し、通常は、更に前述した各種ホスト化合物を含有する。この発光層5は、電界を与えられた電極間において、陽極2から注入されて正孔輸送層4を移動する正孔と、陰極8から注入されて正孔阻止層6を移動する電子との再結合により励起されて、強い発光を示す。その発光スペクトルにおける最大発光波長は、本発明の有機イリジウム錯体由来するものである。本発明の有機イリジウム錯体の使用は、比較的長波長、特に波長560nm以上に発光ピークを有する素子を得る際に、特に好ましい。

【0178】なお、発光層5は、本発明の性能を損なわ

10

20

30

40

50

ない範囲で、本発明の有機イリジウム錯体およびホスト化合物以外の成分を含有していても良い。

【0179】例えば発光層に、(1)ホスト化合物、および(2)本発明の有機イリジウム錯体のほかに、(3)室温で燐光発光を示し、その最大発光波長が(2)の最大発光波長より短波長である化合物、を含有してもよい。これは、上記(3)の化合物を併用することにより、これが増感剤の役割を果たし、本発明の有機イリジウム錯体の発光が強められるためである。

【0180】上記(3)は、本発明の一般式[i]で表される化合物の中から選択しても良いし、また本明細書内で引用した各種文献・特許などに記載の公知の燐光性化合物の中から選んでも良い。上記(3)の条件を満たす限り、その構造に制限はない。

【0181】燐光発光を示す、前記一般式[i]で表される本発明の有機イリジウム錯体の含有量は、発光層全体に対し0.1~30重量%の範囲が好ましい。発光層中の該有機イリジウム錯体の含有量が0.1重量%未満では、素子の発光効率の向上に十分に寄与することができない可能性があり、30重量%を超えると濃度消光が生じ、発光効率の低下が起こる恐れがある。

【0182】前記一般式[i]で表される本発明の有機イリジウム錯体は、発光層内に均一に分布していても良く、膜厚方向に分布をもって、不均一に存在していても良い。

【0183】発光層5の膜厚は、通常10~200nm、好ましくは20~100nmである。

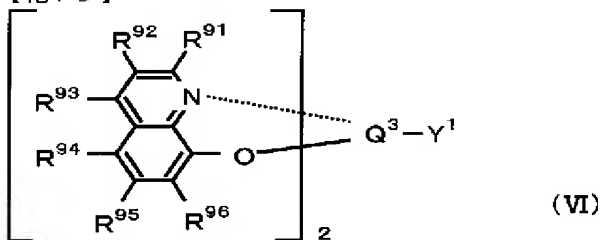
【0184】発光層5は正孔輸送層4と同様の方法にて薄膜形成される。

【0185】正孔阻止層6は発光層5の上に、発光層5の陰極側の界面に接するように積層され、正孔輸送層4から移動してくる正孔が陰極8に到達するのを阻止する役割と、陰極8から注入された電子を効率良く発光層5の方向に輸送することができる化合物より形成される。正孔阻止層6を構成する材料に求められる物性としては、電子移動度が高く正孔移動度が低いことが挙げられる。正孔阻止層6は正孔と電子を発光層5内に閉じこめて、発光効率を向上させる機能を有する。

【0186】このような条件を満たす正孔阻止材料として、好ましくは、下記一般式(VI)で表わされる混合配位子錯体が挙げられる。

【0187】

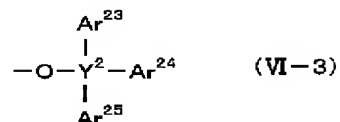
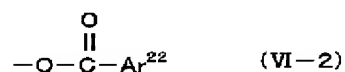
【化73】



(VI) 式中、R⁹¹~R⁹⁶は、水素原子または任意の置換基を表わす。Q³はアルミニウム、ガリウム、インジウムから選ばれる金属原子を表わす。Y¹は以下に示す一般式(VI-1)、(VI-2)、(VI-3)のいずれかで表わされる。

【0188】

【化74】



(式中、Ar²¹~Ar²⁵は、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表わし、Y²はシリコンまたはゲルマニウムを表わす。)

【0189】前記一般式(VI)において、R⁹¹~R⁹⁶は各々独立に水素原子または任意の置換基を表すが、好ましくは水素原子；塩素、臭素等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2~6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基；エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2~6のアルコキシカルボニル基；カルボキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基等のアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わす。

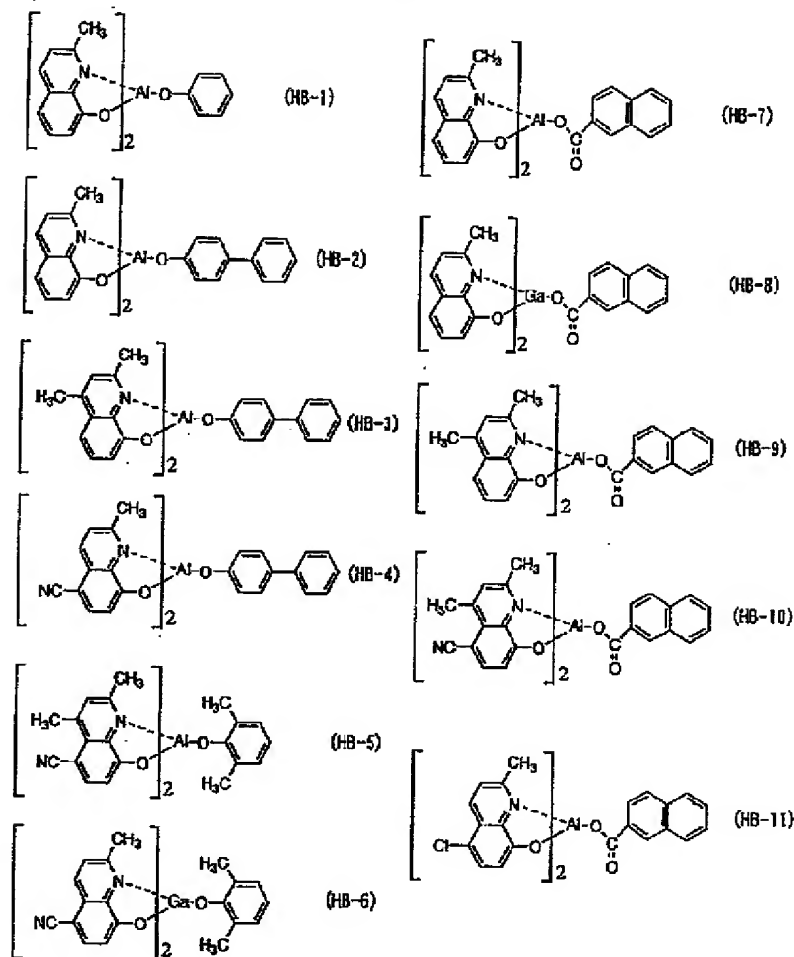
【0190】前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有する置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2~6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2~6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のアルキルアミノ基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

【0191】R⁹¹~R⁹⁶としてより好ましくは水素原子、アルキル基、ハロゲン原子またはシアノ基が挙げら

れる。またR⁹⁴としては、シアノ基が特に好ましい。

【0192】上記一般式(VI)中、Ar²¹~Ar²⁵として、具体的には、置換基を有していても良いフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基またはチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基が挙げられる。中でも5員環、6員環、5員環および／または6員環が2個または3個縮合したもの、あるいはこれらが直接結合で2個または3個結合したものが好ましい。芳香族炭化水素環基と芳香族複素環基では、芳香族炭化水素環基が好ましい。

* 10



【0196】

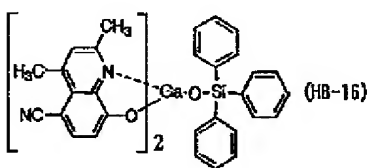
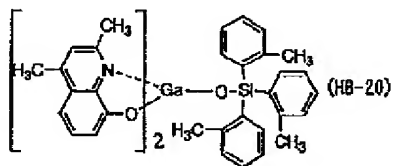
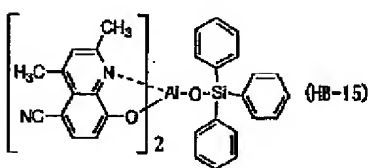
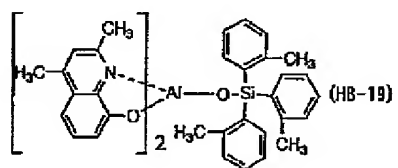
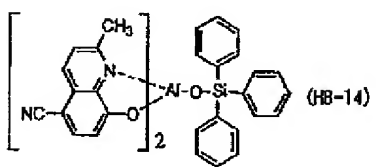
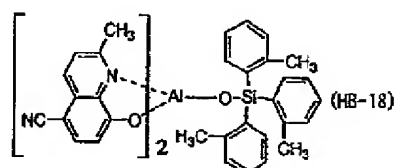
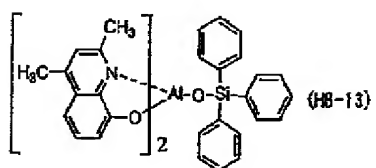
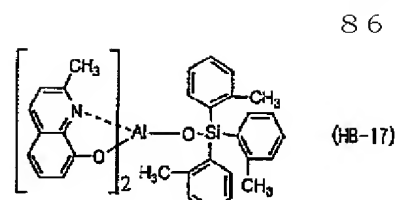
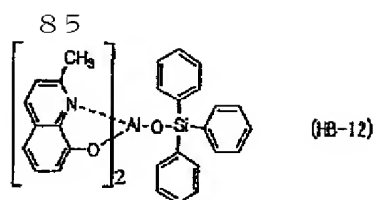
※ ※【化76】

* 【0193】なおAr²¹~Ar²⁵が有しうる置換基としては、例えばR⁹¹~R⁹⁶が芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基の場合に有しうる置換基として、前述したものと同様の基が挙げられる。

【0194】前記一般式(VI)で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

【0195】

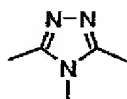
【化75】



【0197】正孔阻止材料としては、前記一般式(VI)の混合配位子錯体の他に、以下の構造式で示される1, 2, 4-トリアゾール環残基を少なくとも1個有する化合物も用いることができる。

【0198】

【化77】



* 【0199】上記構造式で表わされる1, 2, 4-トリアゾール環残基を少なくとも1個有する化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

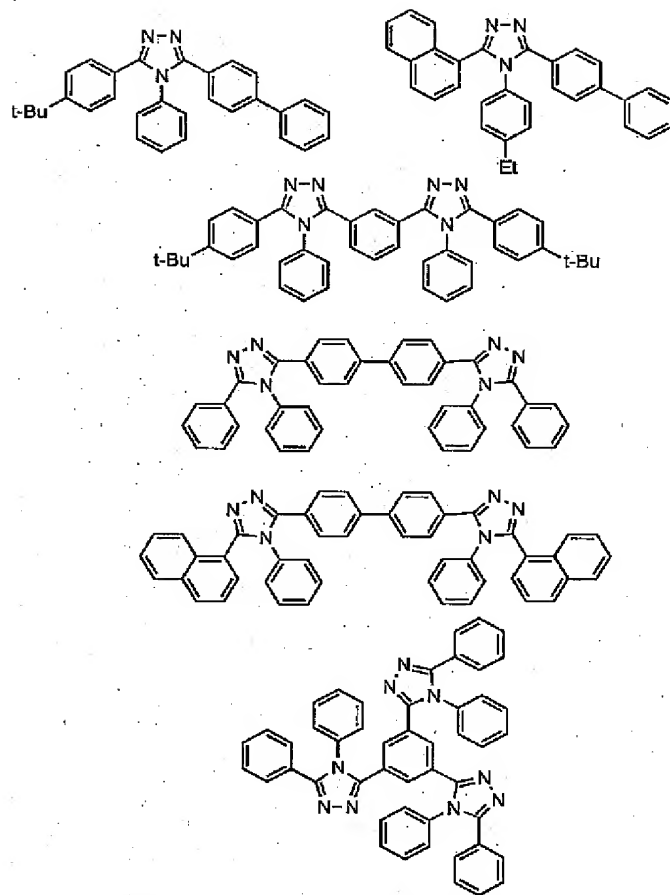
30 【0200】

【化78】

*

87

88

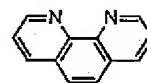


【0201】なお、上記構造式中には記載していないが、これらの化合物におけるベンゼン環およびナフタレン環は、更に置換基を有していても良い。該置換基としては、例えば $R^{91} \sim R^{96}$ が芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基である場合に有しうる置換基として、前述したものと同様の基が挙げられる。

【0202】正孔阻止材料として、さらに、以下の構造式で示されるフェナントロリン環を少なくとも1個有する化合物も用いることができる。

【0203】

*【化79】

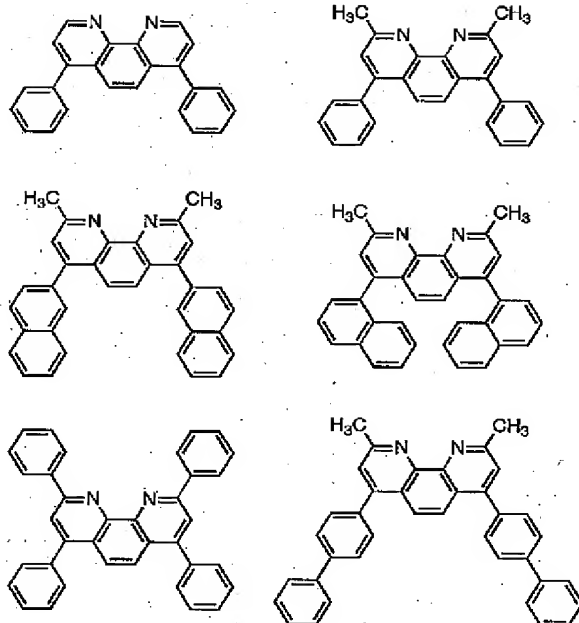


【0204】上記構造式で表わされるフェナントロリン環を少なくとも1個有する化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

【0205】

【化80】

*



【0206】これらの化合物についても、前記1, 2, 4-トリアゾール環残基を有する化合物の場合と同様、構造式中に明記したもの以外にも置換基を有していても良く、この場合の置換基としては、例えばR⁹¹～R⁹⁶が芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基である場合に有する置換基として、前述したものと同様の基が挙げられる。

【0207】なお、上述した各々の正孔阻止材料の化合物は正孔阻止層6中に、単独で用いても良いし、必要に応じて、2種以上を混合して用いても良い。

【0208】正孔阻止層6の膜厚は、通常0.3～100nm、好ましくは0.5～50nmである。正孔阻止層6も正孔

【0209】陰極8は、正孔阻止層6を介して発光層5に電子を注入する役割を果たす。陰極8として用いられる材料は、前記陽極2に使用される材料を用いることが可能であるが、効率良く電子注入を行なうには、仕事関数の低い金属が好ましく、スズ、マグネシウム、インジウム、カルシウム、アルミニウム、銀等の適当な金属またはそれらの合金が用いられる。具体例としては、マグネシウム-銀合金、マグネシウム-インジウム合金、アルミニウム-リチウム合金等の低仕事関数合金電極が挙げられる。

【0210】陰極8の膜厚は通常、陽極2と同様である。

【0211】低仕事関数金属から成る陰極を保護する目的で、この上にさらに、仕事関数が高く大気に対して安定な金属層を積層することは素子の安定性を増す上で好ましい。この目的のために、アルミニウム、銀、銅、ニッケル、クロム、金、白金等の金属が使われる。

【0212】素子の発光効率をさらに向上させることを*

* 目的として、図2に示す如く、正孔阻止層6と陰極8の間に電子輸送層7を設けることが考えられる。電子輸送層7は、電界を与えられた電極間において陰極8から注入された電子を効率良く正孔阻止層6の方向に輸送することができる化合物より形成される。

【0213】従って、電子輸送層7に用いられる電子輸送性化合物としては、陰極8からの電子注入効率が高く、かつ、高い電子移動度を有し注入された電子を効率良く輸送することができる化合物であることが必要である。

【0214】このような条件を満たす材料としては、8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体等の金属錯体（特開昭59-194393号公報）、10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリンの金属錯体、オキサジアゾール誘導体、ジスチリルビフェニル誘導体、シロール誘導体、3-または5-ヒドロキシフラボン金属錯体、ベンゾオキサゾール金属錯体、ベンゾチアゾール金属錯体、トリスベンズイミダゾリルベンゼン（米国特許第5,645,948号）、キノキサリン化合物（特開平6-207169号公報）、フェナントロリン誘導体（特開平5-331459号公報）、2-*t*-ブチル-9,10-N,N'-ジシアノアントラキノンジイミン、*n*型水素化非晶質炭化シリコン、*n*型硫化亜鉛、*n*型セレン化亜鉛などが挙げられる。

【0215】また、上述のような電子輸送性化合物に、アルカリ金属をドーピングする（特開平10-270171号公報、特願2000-285656号、特願2000-285657号などに記載）ことにより、電子輸送性が向上するため好ましい。

【0216】電子輸送層6の膜厚は、通常5～200nm、好ましくは10～100nmである。

【0217】電子輸送層7は、正孔輸送層4と同様にし

て塗布法あるいは真空蒸着法により正孔輸送層6上に積

層することにより形成される。通常は、真空蒸着法が用いられる。

【0218】また、正孔注入の効率をさらに向上させ、かつ、有機層全体の陽極2への付着力を改善させる目的で、図3に示す如く、正孔輸送層4と陽極2との間に陽極バッファ層3を挿入することも行われている。陽極バッファ層3を挿入することで、初期の素子の駆動電圧が下げると同時に、素子を定電流で連続駆動した時の電圧上昇も抑制される効果が得られる。陽極バッファ層3に用いられる材料に要求される条件としては、陽極2との

10 コンタクトが良く均一な薄膜が形成でき、熱的に安定、すなわち、融点及びガラス転移温度が高く、融点としては300℃以上、ガラス転移温度としては100℃以上が要求される。さらに、イオン化ポテンシャルが低く陽極2からの正孔注入が容易なこと、正孔移動度が大きいことが挙げられる。

【0219】この目的のために、これまでに銅フタロシアニン等のフタロシアニン化合物（特開昭63-295695号公報）、ポリアニリン（Appl. Phys. Lett., 64巻、1245頁、1994年）、ポリチオフェン（Optical Materials, 9巻、125頁、1998年）等の有機化合物や、スパッタ・カーボン膜（Synth. Met., 91巻、73頁、1997年）や、バナジウム酸化物、ルテニウム酸化物、モリブデン酸化物等の金属酸化物（J. Phys. D, 29巻、2750頁、1996年）が報告されている。

【0220】また、正孔注入・輸送性の低分子有機化合物と電子受容性化合物を含有する層（特開平11-251067号公報、特開2000-159221号公報等に記載）や、芳香族アミノ基等を有する非共役系高分子化合物に、必要に応じて電子受容性化合物をドーピングする層（特開平11-283750号公報、特開2000-36390号公報、特開2000-150168号公報、特開2001-223084号公報など）なども、好ましい。

*【0221】陽極バッファ層3も、正孔輸送層4と同様にして薄膜形成可能であるが、無機物の場合には、さらに、スパッタ法や電子ビーム蒸着法、プラズマCVD法が用いられる。

【0222】以上の様にして形成される陽極バッファ層3の膜厚は、通常3~100nm、好ましくは5~50nmである。

【0223】さらに、陰極8と発光層5または電子輸送層7との界面にLiF、MgF₂、Li₂O等の極薄絶縁膜（膜厚0.1~5nm）を挿入することも、素子の効率を向上させる有効な方法である（Appl. Phys. Lett., 70巻、152頁、1997年；特開平10-74586号公報；IEEE Trans. Electron. Devices, 44巻、1245頁、1997年）。

【0224】なお、図1とは逆の構造、すなわち、基板上に陰極8、正孔阻止層6、発光層5、正孔輸送層4、陽極2の順に積層することも可能であり、既述したように少なくとも一方が透明性の高い2枚の基板の間に本発明の有機電界発光素子を設けることも可能である。同様に、図2および図3に示した前記各層構成とは逆の構造に積層したり、2枚の基板間に設けたりすることも可能である。更に、図1、図2および図3に示した各層以外にも、陽極または陰極と発光層との間に任意の層を有していても良い。

【0225】本発明は、有機電界発光素子が、単一の素子、アレイ状に配置された構造からなる素子、陽極と陰極がX-Yマトリックス状に配置された構造のいずれにおいても適用することができる。

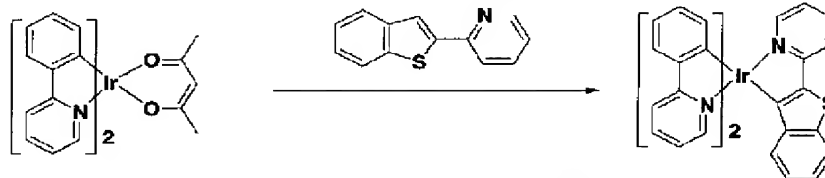
【0226】

【実施例】次に、実施例及び比較例を挙げて本発明を更に具体的に説明するが、本発明はその要旨を超えない限り、以下の実施例の記載に限定されるものではない。

【0227】[有機イリジウム錯体の合成例]

実施例1

【化81】

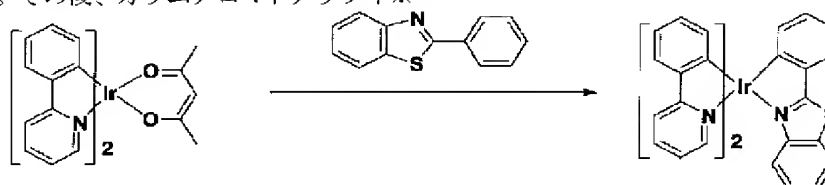


【0228】ビス（2-フェニルピリジン）イリジウムアセチルアセトネート616 mgと2-ベンゾフェニルピリジン528 mgの混合物にグリセロール15 mLを加え、窒素下、210℃で15時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた沈殿物を濾過、メタノール洗浄を行い、粗生成物507 mgを得た。その後、カラムクロマトグラフィ※

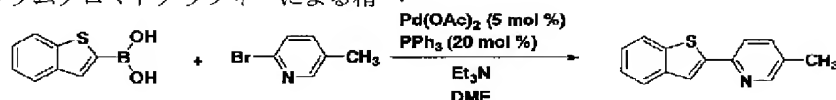
40※一による精製、昇華精製を行い、190 mgの赤色結晶を得た。得られた化合物のマス測定結果（M/e：711.13）により目的物であることが確認できた。

【0229】実施例2

【化82】



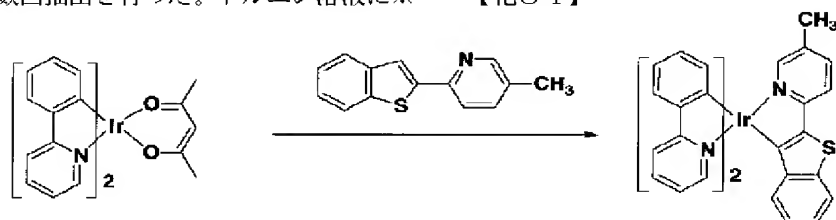
【0230】ビス(2-フェニルピリジン)イリジウムアセチルアセトネート616 mgと2-フェニルベンゾチアゾール528 mgにグリセロール15 mLを加え、窒素下、210℃で10時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた沈殿物を濾過、メタノール洗浄して、粗生成物56 mgを得た。その後、カラムクロマトグラフィーによる精



【0232】2-チオナフテンボロン酸9.1 gと2-ブロモ-3-メチルピリジン7.7 g、酢酸パラジウム(Pd(OAc)₂) 516 mg、トリフェニルフォスフィン3.1gに脱水ジメチルホルムアミド(DMF) 40 mL、トリエチルアミン24 mLを加え、窒素下、100℃で10時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、水200 mLを加え、トルエンで数回抽出を行った。トルエン溶液に※

10※硫酸ナトリウムを加えて乾燥し、濾過後、溶液を濃縮した。得られた沈殿物をカラムクロマトグラフィーにより精製し、3.9 gの白色固体を得た。得られた化合物のNMR、マス測定結果(M/e: 225.06)により目的物であることが確認できた。

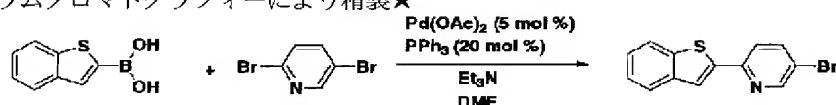
【0233】実施例4
【化84】



【0234】ビス(2-フェニルピリジン)イリジウムアセチルアセトネート616 mgと2-ベンゾチエニル-5-メチルピリジン220 mgにグリセロール10 mLを加え、窒素下、200℃で12時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた沈殿物を濾過、メタノール洗浄した。得られた沈殿物をカラムクロマトグラフィーにより精製★

★し、46 mgの赤色結晶を得た。得られた化合物のマス測定結果(M/e: 725.15)により目的物であることが確認できた。

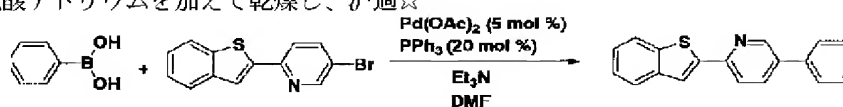
【0235】実施例5
【化85】



【0236】2-チオナフテンボロン酸3.6 gと2,3-ジブロモピリジン3.3 g、酢酸パラジウム224 mg、トリフェニルフォスフィン1.0 gに脱水DMF 30 mL、トリエチルアミン 18 mLを加え、窒素下、110℃で12時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、水200 mLを加え、クロロホルムで数回抽出を行った。クロロホルム溶液に硫酸ナトリウムを加えて乾燥し、濾過☆

☆後、溶液を濃縮した。得られた沈殿物をカラムクロマトグラフィーにより精製し、2.0 gの白色固体を得た。得られた化合物のマス測定結果(M/e: 288.98)により目的物であることが確認できた。

【0237】実施例6
【化86】



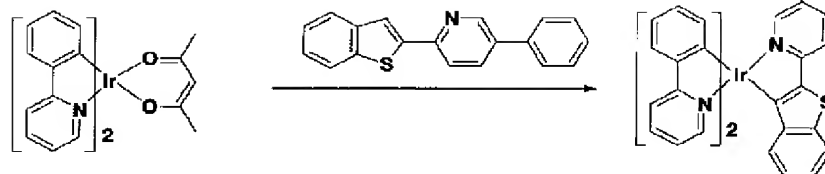
【0238】フェニルボロン酸546 gと実施例5で得られた5-ブロモ-2-ベンゾチエニルピリジン1.0 g、酢酸パラジウム61 mg、トリフェニルフォスフィン283 mgに脱水DMF 10 mL、トリエチルアミン6 mLを加え、窒素下、120℃で12時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、水200 mLを加え、トルエンで数回抽出を行った。トルエン溶液に硫酸ナトリウムを加え◆

◆乾燥し、濾過後、溶液を濃縮した。得られた沈殿物をカラムクロマトグラフィーにより精製し、389mgの白色固体を得た。得られた化合物のマス測定結果(M/e: 287.08)により目的物であることが確認できた。

【0239】実施例7
【化87】

95

96

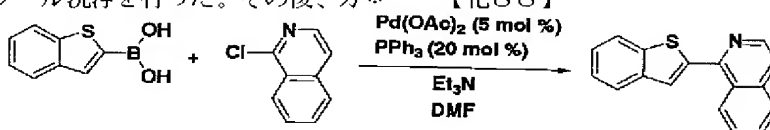


【0240】ビス(2-フェニルピリジン)イリジウム
アセチルアセトネート308 mgと実施例6で得られた化合物
230 mgをグリセロール 15 mLに加え、窒素下、15
0℃で3時間反応させた。室温まで冷却した後、得られ
た沈殿物を濾過、メタノール洗浄を行った。その後、カ*

*ラムクロマトグラフィーによる精製を行い、46 mgの赤
色結晶を得た。得られた化合物のマス測定結果(M/e :
787.16)により目的物であることが確認できた。

【0241】実施例8

【化88】

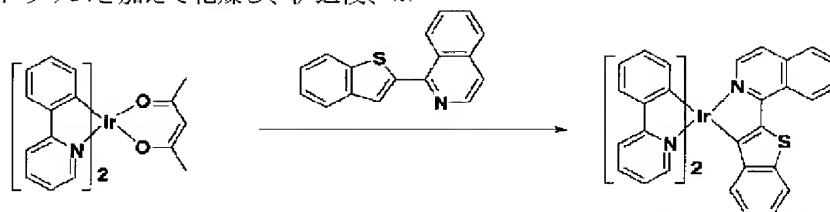


【0242】2-チオナフテンボロン酸1.8 gと2-ク
ロロキノリン1.5 g、酢酸パラジウム224 mg、トリフェ
ニルホスフィン1.1 g に脱水DMF 20 mL、トリエチル
アミン12 mLを加え、窒素下、120℃で13時間反応
させた。反応溶液を室温まで冷却した後、水200 mL
を加え、ジクロロメタンで数回抽出を行った。ジクロロ
メタン溶液に硫酸ナトリウムを加えて乾燥し、濾過後、※

※溶液を濃縮した。得られた沈殿物をカラムクロマトグラ
フィーにより精製し、665 mgの白色固体を得た。得られ
た化合物のマス測定結果(M/e :261.06)により目的物
であることが確認できた。

【0243】実施例9

【化89】

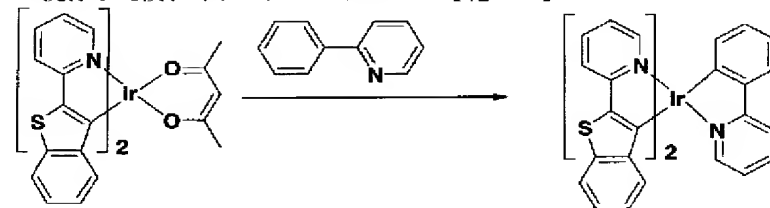


【0244】ビス(2-フェニルピリジン)イリジウム
アセチルアセトネート308 mgと実施例8で得られた化合物
208 mgにグリセロール15 mLを加え、窒素下、240
℃で2時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた
沈殿物を濾過、メタノール洗浄した後、カラムクロマト★

★グラフィーによる精製、昇華精製を行い、51 mgの赤色
結晶を得た。得られた化合物のマス測定結果(M/e :76
1.15)により目的物であることが確認できた。

【0245】実施例10

【化90】



【0246】ビス(2-ベンゾチエニルピリジル)イリ
ジウムアセチルアセトネート308 mgと2-フェニルピリ
ジン39 mgにグリセロール15 mLを加え、窒素下、180
℃で3時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた
沈殿物を濾過、メタノール洗浄した後、カラムクロマト
グラフィーによる精製を行い、22 mgの赤色結晶を得
た。得られた化合物のマス測定結果(M/e : 767.10)に
より目的物であることが確認できた。

【0247】〔有機電界発光素子の作製例〕

☆実施例11

図3に示す構造を有する有機電界発光素子を以下の方法
で作製した。

【0248】ガラス基板1上にインジウム・スズ酸化物
(ITO) 透明導電膜を 150nm堆積したもの(ジオマテ
ック社製; 電子ビーム成膜品; シート抵抗15Ω)を通常
のフォトリソグラフィ技術と塩酸エッチングを用いて 2
mm幅のストライプにパターニングして陽極2を形成し
た。パターン形成したITO基板を、アセトンによる超

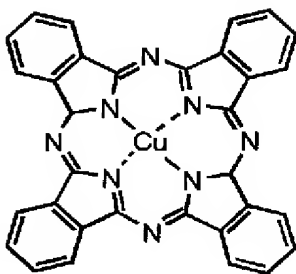
☆50

音波洗浄、純水による水洗、イソプロピルアルコールによる超音波洗浄の順で洗浄後、窒素ブローで乾燥させ、最後に紫外線オゾン洗浄を行って、真空蒸着装置内に設置した。上記装置の粗排気を油回転ポンプにより行った後、装置内の真空度が 2×10^{-6} Torr (約 2.7×10^{-4} Pa) 以下になるまで液体窒素トラップを備えた油拡散ポンプを用いて排気した。

【0249】陽極バッファ層3の材料として、下記に示す構造式の銅フタロシアニンを用い、これをモリブデンボートを用いて蒸着速度 $0.1\text{nm}/\text{秒}$ 、真空度 1.2×10^{-6} Torr (約 1.6×10^{-4} Pa) で、 10nm の膜厚で陽極2の上に成膜した。

【0250】

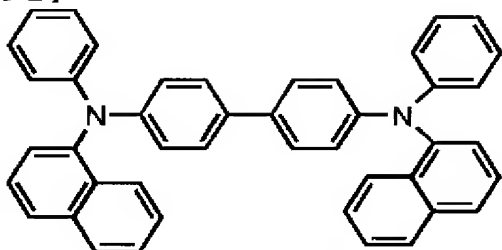
【化91】



【0251】次に上記装置内に配置されたセラミックるつぼに入れた、以下に示す、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニルをるつぼの周囲のタantal線ヒーターで加熱して蒸着を行った。この時のるつぼの温度は、 $220 \sim 230^\circ\text{C}$ の範囲で制御した。蒸着時の真空度 1.0×10^{-6} Torr (約 1.3×10^{-4} Pa)、蒸着速度は $0.2\text{nm}/\text{秒}$ で膜厚 60nm の正孔輸送層4を得た。

【0252】

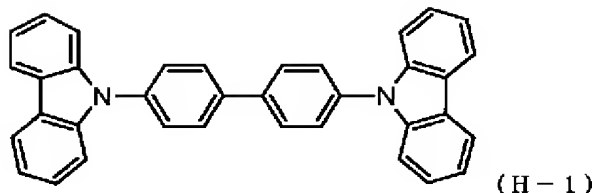
【化92】



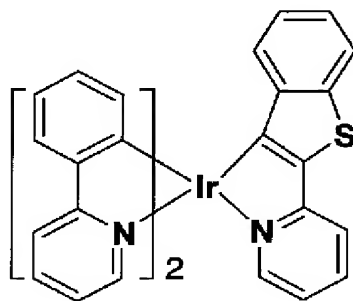
引続き、発光層5の主成分(ホスト化合物)として下記に示すN-フェニルカルバゾール誘導体(H-1)を、副成分(ドーパント)として、本文中にも例示した混合配位子型有機イリジウム錯体(T-1)を別々のセラミックるつぼに設置し、2元同時蒸着法により成膜を行った。

【0253】

【化93】



(H-1)



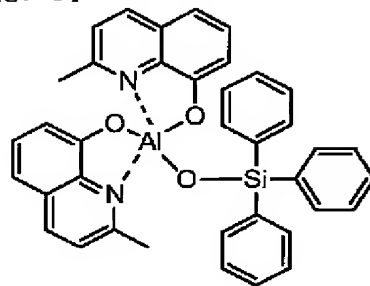
(T-1)

【0254】化合物(H-1)のるつぼ温度は $250 \sim 260^\circ\text{C}$ に、蒸着速度は $0.2\text{nm}/\text{秒}$ に制御し、有機イリジウム錯体(T-2)は $315 \sim 325^\circ\text{C}$ の温度範囲に制御し、膜厚 30nm で有機イリジウム錯体(T-2)が5重量%含有された発光層5を正孔輸送層4の上に積層した。蒸着時の真空度は 1.3×10^{-6} Torr (約 1.7×10^{-4} Pa)であった。

【0255】さらに、正孔阻止層6として例示化合物(HB-12)をるつぼ温度を 255°C として、蒸着速度 $0.3\text{nm}/\text{秒}$ で 10nm の膜厚で積層した。蒸着時の真空度は 1.1×10^{-6} Torr (約 1.4×10^{-4} Pa)であった。

【0256】

【化94】

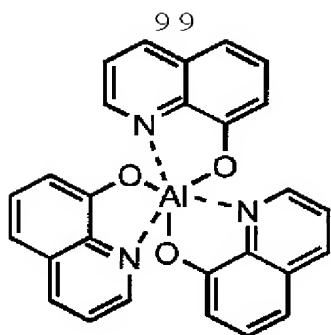


(HB-12)

【0257】正孔阻止層6の上に、電子輸送層7として以下の構造式に示すアルミニウムの8-ヒドロキシキノリン錯体($\text{Al}(\text{C}_9\text{H}_6\text{NO})_3$)を同様に蒸着した。この時のアルミニウムの8-ヒドロキシキノリン錯体のるつぼ温度は $290 \sim 315^\circ\text{C}$ の範囲で制御し、蒸着時の真空度は 0.9×10^{-6} Torr (約 1.2×10^{-4} Pa)、蒸着速度は $0.2\text{nm}/\text{秒}$ で膜厚は 35nm とした。

【0258】

【化95】



【0259】上記の正孔輸送層、発光層、正孔阻止層及び電子輸送層を真空蒸着する時の基板温度は室温に保持した。

【0260】ここで、電子輸送層7までの蒸着を行った素子を一度前記真空蒸着装置内より大気中に取り出して、陰極蒸着用のマスクとして2mm幅のストライプ状シャドーマスクを、陽極2のITOストライプとは直交するように素子に密着させて、別の真空蒸着装置内に設置して有機層と同様にして装置内の真空度が 2.4×10^{-6} Torr (約 3.2×10^{-4} Pa) 以下になるまで排気した。陰極8として、まず、フッ化リチウム (LiF) をモリブデンボートを用いて、蒸着速度0.01nm/秒、真空度 3.8×10^{-6} Torr (約 5.0×10^{-4} Pa) で、0.5nmの膜厚で電子輸送層7の上に成膜した。次に、アルミニウムを同様にモリブデンボートにより加熱して、蒸着速度0.5nm/秒、真空度 7.7×10^{-6} Torr (約 1.0×10^{-3} Pa) で膜厚80nmのアルミニウム層を形成して陰極8を完成させた。以上の2層型陰極8の蒸着時の基板温度は室温に保持した。

【0261】以上の様にして、2mm×2mmのサイズの発光面積部分を有する有機電界発光素子が得られた。この素子の発光特性を表1に示す。表1において、最大発光輝度は電流密度0.25A/cm²での値、発光効率・輝度/電流・電圧は輝度100cd/m²での値を各々示す。素子の発光スペクトルの極大波長は600nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) からのものと同定された。

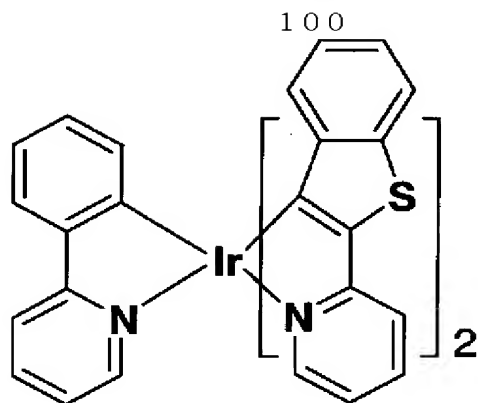
【0262】なお、作製された素子を電流密度0.25A/cm²でDC駆動し、素子の安定性を評価したところ、この素子の60秒後の輝度比 (60秒後の輝度/初期輝度) は0.96と良好であった。

【0263】実施例12

発光層の副成分として混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-2) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は600nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-2) からのものと同定された。

【0264】

【化96】

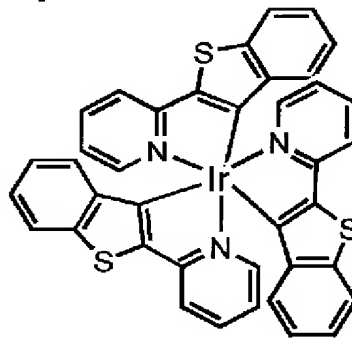


【0265】比較例1

発光層の副成分の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (T-3) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は実施例1と同様600nmであり、有機イリジウム錯体 (T-3) からのものと同定された。

【0266】

【化97】

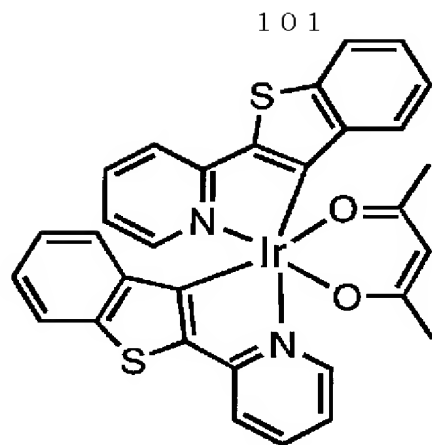


【0267】比較例2

発光層の副成分の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (T-4) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は618nmであり、有機イリジウム錯体 (T-4) からのものと同定された。

【0268】

【化98】



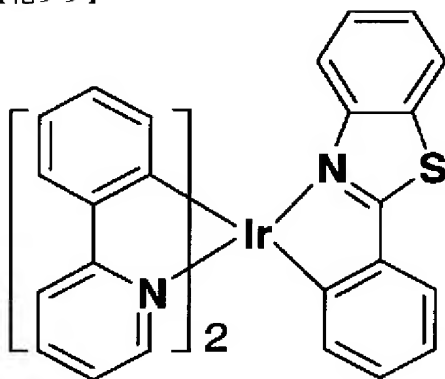
(T-4)

【0269】実施例13

発光層の副成分の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-5) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 568nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-5) からのものと同定された。

【0270】

【化99】



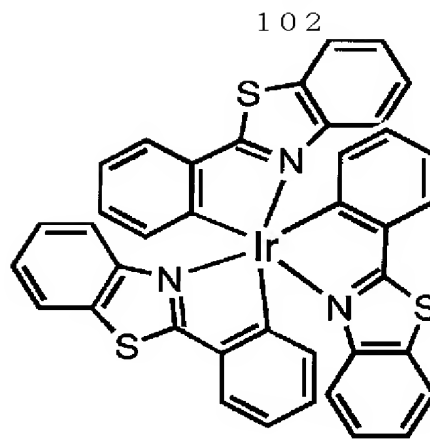
(T-5)

【0271】比較例3

発光層の副成分の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-5) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (T-6) を用いた他は実施例13と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は552nmであり、有機イリジウム錯体 (T-6) からのものと同定された。

【0272】

【化100】



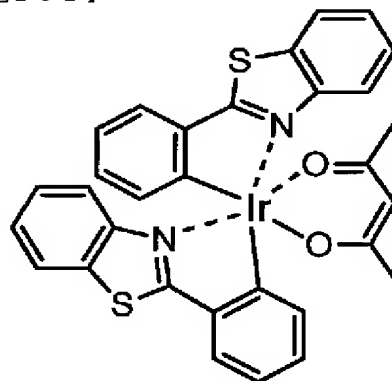
(T-6)

【0273】比較例4

発光層の副成分の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-5) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (T-7) を用いた他は実施例13と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は563nmであり、有機イリジウム錯体 (T-7) からのものと同定された。

【0274】

【化101】



(T-7)

【0275】実施例14

発光層の副成分として混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (T-8) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 599nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-8) からのものと同定された。

【0276】

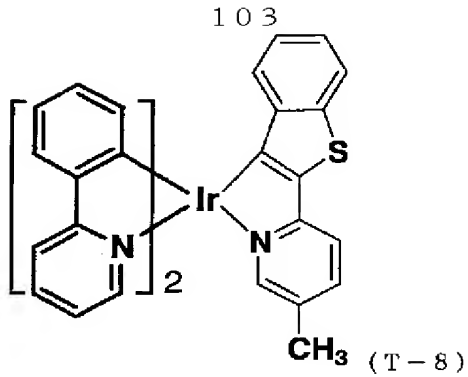
【化102】

10

20

30

40

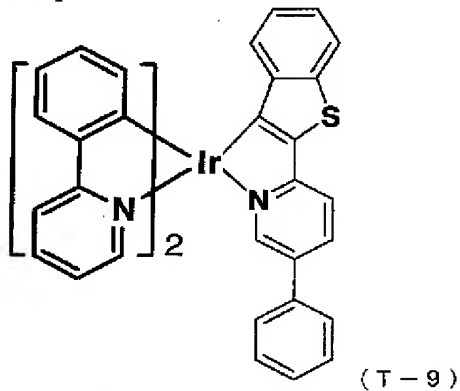


【0277】実施例15

発光層の副成分として混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-9) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 631nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-9) からのものと同定された。

【0278】

【化103】



【0279】実施例16

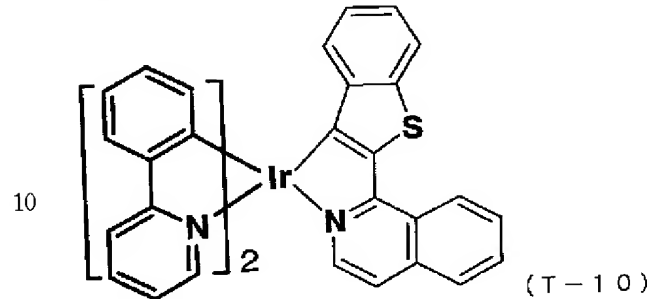
発光層の副成分として混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-10) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。素子の発光スペクトルの極大波長は

104

698nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-10) からのものと同定された。

【0280】

【化104】



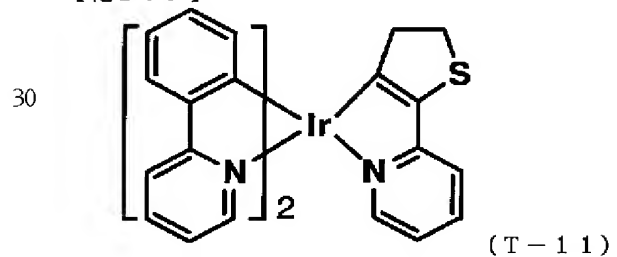
【0281】比較例4

発光層の副成分として混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記の混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-11) を用いた他は実施例11と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表1に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 553nmであり、混合配位子型有機イリジウム錯体 (T-11) からのものと同定された。

【0282】この素子を実施例11と同様に電流密度0.25A/cm²でDC駆動し、素子の安定性を評価したところ、この素子の60秒後の輝度比 (60秒後の輝度/初期輝度) は0.51と非常に不安定であった。

【0283】

【化105】



【0284】

【表5】

105

106

	最大発光 輝度 [cd/m ²] @0.25A/cm ²	発光効率 [lm/W] @100cd/m ²	輝度／電流 [cd/A] @100cd/m ²	電圧 [V] @100cd/m ²
実施例11	5290	3.6	6.9	6.0
実施例12	5120	4.2	7.8	5.9
比較例1	4520	2.7	5.2	6.2
比較例2	3530	1.7	3.7	7.0
実施例13	23720	7.7	13.3	5.5
比較例3	14430	3.7	6.1	5.2
比較例4	8790	1.9	3.8	6.3
実施例14	4470	3.3	6.4	6.0
実施例15	1790	0.75	1.81	7.7
実施例16	赤外(898nm)で発光したため測定不可			

【0285】

【発明の効果】以上詳述した通り、本発明によれば、長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化、及び素子の長寿命化が可能な新規混合配位子型有機イリジウム錯体と、この有機イリジウム錯体を用いた長寿命で高

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の有機電界発光素子の実施の形態の一例を示した模式的断面図である。

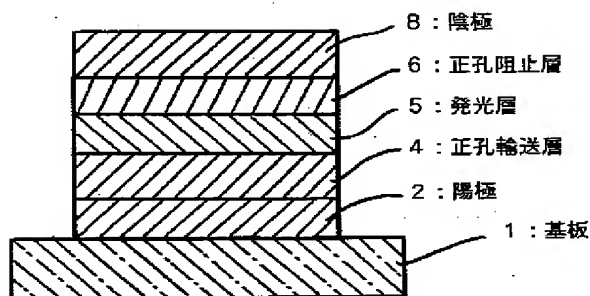
【図2】本発明の有機電界発光素子の実施の形態の別の例を示した模式的断面図である。

*【図3】本発明の有機電界発光素子の実施の形態の別の例を示した模式的断面図である。

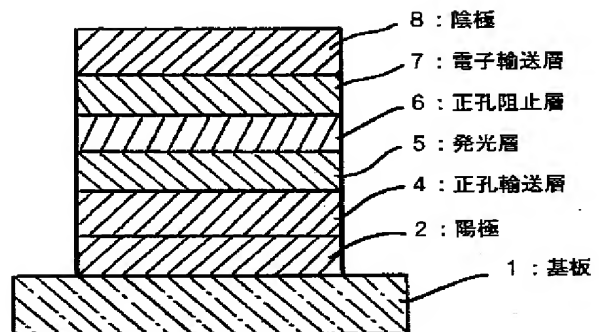
【符号の説明】

- 1 基板
- 2 陽極
- 3 陽極バッファ層
- 4 正孔輸送層
- 5 発光層
- 6 正孔阻止層
- 7 電子輸送層
- 8 陰極

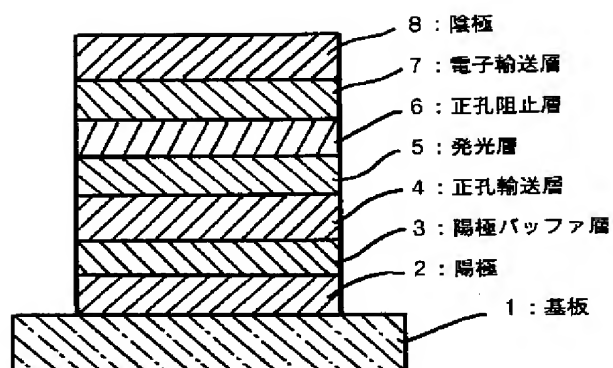
【図1】



【図2】



【図3】



フロントページの続き

(72)発明者 佐藤 佳晴
神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番地
三菱化学株式会社内

Fターム(参考) 3K007 AB02 AB03 AB04 AB11 DB03
4H050 AA01 AB91

PAT-NO: JP02003192691A
DOCUMENT-IDENTIFIER: JP 2003192691 A
TITLE: ORGANIC IRIIDIUM COMPLEX AND
ORGANIC ELECTROLUMINESCENT
ELEMENT
PUBN-DATE: July 9, 2003

INVENTOR-INFORMATION:

NAME	COUNTRY
AKIYAMA, SEIJI	N/A
SATO, HIDEKI	N/A
SATO, YOSHIHARU	N/A

ASSIGNEE-INFORMATION:

NAME	COUNTRY
MITSUBISHI CHEMICALS CORP	N/A

APPL-NO: JP2001394446
APPL-DATE: December 26, 2001

INT-CL (IPC): C07F015/00 , C09K011/06 ,
H05B033/14 , H05B033/22

ABSTRACT:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a new mixed ligand-having organic iridium complex giving a luminescent element having improved color purity

in the emission of light of long wavelength, high luminescent efficiency and a long life and provide an organic electroluminescent element produced by using the organic iridium complex.

SOLUTION: The mixed ligand-having organic iridium complex is expressed by general formula (i), e.g. formula (ii). The organic electroluminescent element has a luminescent layer sandwiched between an anode and a cathode. The luminescent layer contains the mixed ligand-type organic iridium complex.

COPYRIGHT: (C)2003,JPO